



**UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID.**

Departamento de Mecánica de Medios Continuos y Teoría de  
Estructuras.

Trabajo Fin de Grado.

**IMPLEMENTACIÓN DE UN MÓDELO NUMÉRICO  
APLICADO AL ESTUDIO DE NANOESTRUCTURAS DE  
CARBONO DE SIMPLE CAPA.**

Grado en Ingeniería Mecánica.

Autor: Jorge Berlana Hernández

Director: Matías Nicolás Braun

Tutor: Josué Aranda Ruiz





## Agradecimientos

Que estas líneas sirvan como recuerdo de todas aquellas personas con las que he compartido momentos inolvidables, vivido experiencias únicas, y aprendido más que en cualquier etapa anterior de mi vida.

Es lógico que, en primer lugar, agradezca a mi familia: mis padres y hermano. Sin su apoyo, cariño y esfuerzo no estaría aquí, escribiendo esto.

En segundo lugar, a mis amigos, a los que mantengo y a los que no. Todos ellos hicieron que en algún momento los malos ratos fueran menos malos, y los buenos, historias que recordar para siempre.

En tercer lugar, a todos mis compañeros, tanto de clase como de laboratorio, pero especialmente a: Víctor Caballero, Alberto Casado, Roberto Molina, Natalia Sánchez, Silvia Marcos y David Durán. Por la ayuda desinteresada, por la fuerza transmitida cuando las cosas no van bien, por sus consejos, por sus risas... En definitiva, por soportarme muchas horas, cada día, durante todos estos años.

Finalmente, a todos los profesores que hicieron de sus clases, clases diferentes al resto. Clases, en las que no había que hacer esfuerzo para mantener la atención. Clases, en las que no te importaba seguir escuchando su voz, aprendiendo de ellos, horas y horas. Obviamente, a mis tutores: Matías y Josué. Sin su apoyo y guía, habría sido imposible la elaboración de este trabajo.



## Abstract

In recent years, the reinforced materials, sensors or electronic fields have been revolutionized by Nanotechnology Industry. Due to the increase in the number of publications and papers about different Nanostructures, it has been suggested that Nanotechnology could be the solution to a large number of applications that were previously considered impossible.

This growth in the use of Nanostructures should be closely linked with the development of tools in order to study them.

The objective of this work is the implementation of a model that allows the user to simulate Single Walled Carbon Nanostructures in an easy and fast way, by using the commercial Finite Element Code Abaqus.

The study consists of three parts. First part provides an overview of Nanotechnology, where current analytical models are revised and Nanostructures that will be used in this work will be introduced.

Second part, where a model validation is performed by a comparison with published results by other authors.

Finally, the equations obtained from the dynamic analysis of Graphene Sheets and Spherical Fullerenes are shown, which allow the predictive assessment of natural frequencies of vibration.



## Resumen

En los últimos años la Industria de la Nanotecnología ha revolucionado el mundo de los materiales reforzados, los sensores, la electrónica, etc. Debido al incremento del número de publicaciones y trabajos sobre distintas Nanoestructuras se ha desprendido que la Nanotecnología puede dar respuesta a un gran número de aplicaciones a las que antes se les consideraba imposibles de llevar a cabo.

Este aumento en el uso de Nanoestructuras debe ir ligado con el desarrollo de herramientas que permitan el estudio de las mismas.

El objetivo de este documento es la implementación, en el Código Comercial de Elementos Finitos Abaqus, de un modelo que permita al usuario la simulación de Nanoestructuras de Carbono de Simple Capa de una forma sencilla y rápida.

El estudio se compone de tres partes. En la primera se presenta una revisión generalista de la Nanotecnología, se revisan los Modelos de análisis empleados en la actualidad y se presentan las Nanoestructuras sobre las que se va a trabajar.

En la segunda parte se realiza una validación del Modelo empleado mediante la comparación con resultados publicados por otros autores.

Finalmente, se presentan las ecuaciones obtenidas en la realización de análisis dinámicos sobre mono capas de Grafeno y Fullerenos Esféricos que permiten realizar un cálculo expeditivo de las frecuencias.



## Índice General

<b>1. Introducción</b>	12
1.1 Motivaciones	12
1.2 Objetivos	17
1.3 Estructura del documento	17
1.4 Planificación	18
1.5 Presupuesto	19
1.6 Entorno socio-económico	20
<b>2. Conceptos generales</b>	23
2.1 Nanomateriales	23
2.2 El Carbono	24
2.2.1 Formas alotrópicas	24
2.2.2 Enlace carbono-carbono	28
2.3 Modelos existentes	28
2.3.1 Modelo Atómico (MA)	28
2.3.2 Modelo Continuo (MC)	29
2.3.3 Modelo Discreto (MD)	30
2.4 Propiedades mecánicas	30
<b>3. Antecedentes</b>	33
3.1 Introducción	33
3.2 Grafeno	33
3.2.1 Introducción	33
3.1.2 Propiedades mecánicas	34
3.3 Nanotubos de carbono	35
3.3.1 Introducción	35
3.3.2 Propiedades mecánicas	37
3.3.3 Vibraciones	38
3.4 Fullerenos esféricos	39
<b>4. Descripción del modelo propuesto</b>	42
4.1 Introducción	42
4.2 Código de Preproceso	42
4.3 Proceso de cálculo	44
4.3.1 Introducción	44
4.3.2 Propiedades mecánicas	44
4.3.3 Condiciones de contorno	47



<b>5 Validación del modelo.....</b>	<b>51</b>
<b>5.1 Cálculo de propiedades mecánicas.....</b>	<b>51</b>
5.1.1 Grafeno.....	51
5.1.2 Nanotubos de carbono.....	53
<b>5.2 Cálculo de vibraciones y modos propios.....</b>	<b>55</b>
5.2.1 Grafeno .....	55
<b>6. Resultados.....</b>	<b>60</b>
6.1 Grafeno .....	60
6.2 Nanotubos de Carbono .....	69
6.3 Fullerenos.....	74
<b>7. Conclusiones y trabajos futuros.....</b>	<b>85</b>
7.1 Conclusiones .....	85
7.2 Trabajos futuros .....	85
<b>7. Referencias. ....</b>	<b>87</b>
<b>Anexos.....</b>	<b>89</b>
Anexo 1. Código desarrollado para generar la geometría de nanotubos de carbono.....	90
Anexo 2. Código desarrollado para generar la geometría del Grafeno.....	97
Anexo 3. Código desarrollado para generar la geometría de Fullerenos.....	101
Anexo 4. Expresiones y regresiones de las mono capas de Grafeno .....	104
Anexo 5. Figuras de los cinco primeros modos propios Fullerenos Esféricos. ....	108

## Índice de Figuras.

Figura 1. Robert Curl, Sir Harold Kroto y Richard E. Smalley .....	12
Figura 2. Sumio Iijima .....	13
Figura 3. Andréy Gueim y Konstantín Novosiólov.....	13
Figura 4. Esquema funcionamiento NEMS [6]. .....	14
Figura 5. NEMS [8].....	15
Figura 6. Publicaciones, producción y ejemplos de aplicación de CNTs [9].....	16
Figura 7. Mercado Potencial vs. Madurez de la tecnología.[5].....	20
Figura 8. Escalas dimensionales. [12].....	23
Figura 9. Ejemplo de geometría del Carbono amorfo.....	24
Figura 10. Ejemplo de geometría de grafito .....	25
Figura 11. Ejemplo de geometría de Diamante. ....	25
Figura 12. Ejemplo de geometría de Grafeno .....	25
Figura 13. Fullerenos esféricos.....	26
Figura 14. Nanotubos de Carbono. ....	26
Figura 15. Carbono vítreo.....	27
Figura 16. Nano espuma de carbono .....	27
Figura 17. Representación enlace C-C.....	28
Figura 18. Esfuerzos. ....	29
Figura 19. Modelo Continuo para CNTs. ....	30
Figura 20. Modelo Discreto de un CNTs [20] .....	30
Figura 21. Red hexagonal del grafeno.....	33
Figura 22. Formas alotrópicas del carbono. ....	34
Figura 23. Vector Chiral.....	36
Figura 24. Tipos de nanotubos. ....	36
Figura 25. Módulo de cortadura vs Diámetro [22].....	38
Figura 26. Cinco primeros Modos propios para CNTs.....	39
Figura 27. Ejemplo de C60.....	39
Figura 28. Procedimiento. ....	42
Figura 29. Análisis geométrico de una celda hexagonal. ....	43
Figura 30. Elemento tipo Beam.....	46
Figura 31. Masas concentradas en los nodos. ....	47
Figura 32. Condiciones de contorno CNTs .....	48
Figura 33. Condiciones de contorno de Grafeno .....	49
Figura 34. Condiciones de contorno Fullerenos.....	49
Figura 35. Esquema de un ensayo a tracción simple. ....	51
Figura 36. Placa equivalente. ....	52
Figura 37. Ensayo de tracción CNTs. ....	53
Figura 38. Esquema Tubo equivalente.....	54
Figura 39. Esquema Tubo equivalente.....	54
Figura 40. Modos de vibración Grafeno. Estudio [28]. ....	58
Figura 41. Configuración 1. ....	60
Figura 42. Configuración 2. ....	60
Figura 43. Configuración 3. ....	60
Figura 44. Configuración 4. ....	61





Figura 45. Modos Propios Grafeno Configuración 1 .....	67
Figura 46. Modos Propios Grafeno Configuración 2 .....	67
Figura 47. Modos Propios Grafeno Configuración 3 .....	68
Figura 48. Modos Propios Grafeno Configuración 4 .....	68
Figura 49. ZigZag vs. Armchair .....	69
Figura 50. Primer modo propio para Cantilever y Bridge ZigZag. ....	71
Figura 51. Primer modo propio para Cantilever y Bridge Armchair.....	74
Figura 52. Modos Propios C20 .....	108
Figura 53. Modos Propios C30 .....	108
Figura 54. Modos Propios C60 .....	109
Figura 55. Modos Propios C180 .....	109
Figura 56. Modos Propios C240 .....	110
Figura 57. Modos Propios C260 .....	110
Figura 58. Modos Propios C320 .....	111
Figura 59. Modos Propios C720 .....	111

## Índice de tablas.

Tabla 1. Planificación.....	19
Tabla 2. Gastos Personales.....	19
Tabla 3. Gastos Materiales.....	19
Tabla 4. Resumen Costes. ....	20
Tabla 5. Tabla de precios CNTs [11] .....	21
Tabla 6. Evolución del mercado .....	21
Tabla 7. Resultados ensayo de tracción grafeno. [22], [29].....	34
Tabla 8. Resultados Ensayo de tracción simple CNTs [3] .....	37
Tabla 9. Módulo de Cortadura [3].....	38
Tabla 10. Casos a estudio de Ensayo tracción uniaxial Grafeno .....	52
Tabla 11. Resultados Frecuencia Grafeno.....	56
Tabla 12. Coeficientes regresión potencial Configuración 1.....	64
Tabla 13. Coeficientes regresión potencial Configuración 2.....	65
Tabla 14. Coeficientes regresión potencial Configuración 3.....	66
Tabla 15. Coeficientes regresión potencial Configuración 4.....	66
Tabla 16. Resultados Frecuencias Modelo.....	78
Tabla 17. Coeficientes regresión potencial. ....	79
Tabla 18. Resultado Frecuencia Expresión.....	81

## Índice de gráficas

Gráfica 1. Ensayo de Tracción simple.....	53
Gráfica 2. Valor del Módulo de Young vs Relación de aspecto. CNTs.....	55
Gráfica 3. Frecuencia vs Modo de vibración. Grafeno .....	56
Gráfica 4. Frecuencia-Configuración 1 Grafeno. ....	61
Gráfica 5. Frecuencia-Configuración 2 Grafeno. ....	62
Gráfica 6. Frecuencia-Configuración 3 Grafeno. ....	63
Gráfica 7. Frecuencia-Configuración 4 Grafeno. ....	63



Gráfica 8. Coeficiente a. ....	64
Gráfica 9. Coeficiente b. ....	65
Gráfica 10. Frecuencia vs Relación de aspecto para CNT Cantilever – ZigZag. ....	69
Gráfica 11. Frecuencia vs Relación de aspecto para CNT Bridge – ZigZag. ....	70
Gráfica 12. Frecuencia vs Relación de aspecto para CNT Cantilever – Armchair. ....	72
Gráfica 13. Frecuencia vs Relación de aspecto para Bridge – Armchair. ....	73
Gráfica 14. Frecuencia 1 vs Diámetro/acc.....	75
Gráfica 15. Frecuencia 2 vs Diámetro/acc.....	76
Gráfica 16. Frecuencia 3 vs Diámetro/acc.....	76
Gráfica 17. Frecuencia 4 vs Diámetro/acc.....	77
Gráfica 18. Frecuencia 5 vs Diámetro/acc.....	78
Gráfica 19. Regresiones potenciales para las cinco primeras frecuencias Fullerenos Esféricos. ....	79
Gráfica 20. Coeficiente a. ....	80
Gráfica 21. Coeficiente b. ....	80
Gráfica 22. Modelo vs Expresión. Frecuencia 1. ....	81
Gráfica 23. Modelo vs Expresión. Frecuencia 2. ....	82
Gráfica 24. Modelo vs Expresión. Frecuencia 3. ....	82
Gráfica 25. Modelo vs Expresión. Frecuencia 4. ....	83
Gráfica 26. Modelo vs Expresión. Frecuencia 1. ....	83
Gráfica 27. Coeficiente a. ....	104
Gráfica 28. Coeficiente b. ....	105
Gráfica 29. Coeficiente a. ....	106
Gráfica 30. Coeficiente b. ....	106
Gráfica 31. Coeficiente a. ....	107
Gráfica 32. Coeficiente b. ....	107

## Abreviaturas

- CNTs: Carbon Nanotubes. Nanotubos de Carbono.
- DM: Molecular Dynamics. Dinámica Molecular.
- nm: Nanómetro.
- C: Carbono.
- C-C: Enlace Carbono-Carbono.
- Å: Ångström.
- MA: Modelo atómico
- MC: Modelo continuo
- MD: Modelo discreto
- TPa: Tera-Pascales
- GHz: Giga Hertzios
- THz: Tera Hertzios



# Capítulo 1

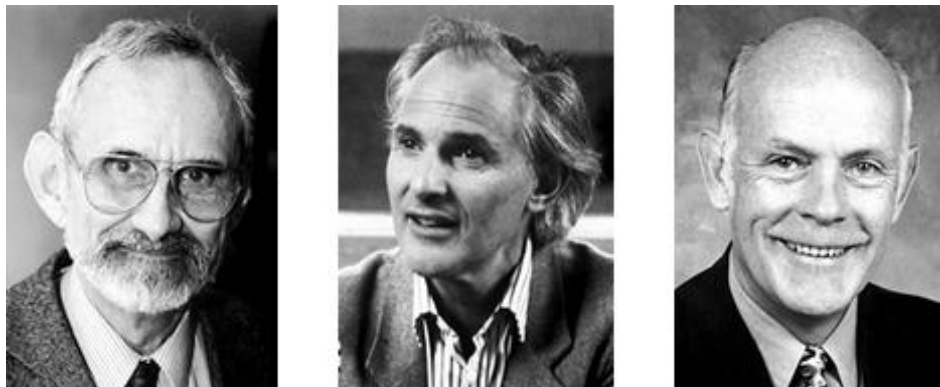
## Introducción

# 1. Introducción

## 1.1 Motivaciones

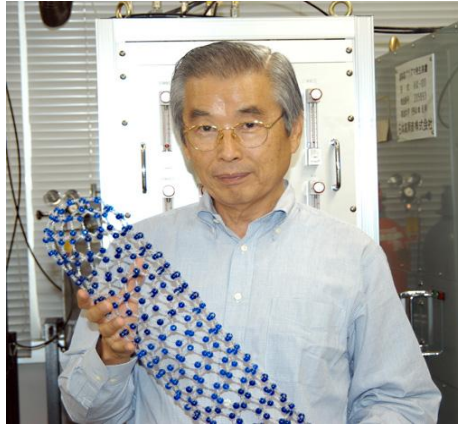
Las nanoestructuras de carbono de simple capa, como su propio nombre indica, se tratan de estructuras que cuentan con alguna dimensión en la escala nanométrica, compuestas mayoritariamente por carbonos y constituidas por una única capa. Se estudiarán: El Grafeno, cuya geometría se asemeja a un plano, los Nanotubos de Carbono, cuya geometría es la de un tubo que presenta una longitud relativamente grande en comparación con su diámetro y los Fullerenos esféricos.

Los Fullerenos esféricos fueron descubiertos en 1985 por Robert Curl, Sir Harold Kroto y Richard E. Smalley [1] lo que les valió para recibir el Premio Nobel de Química en 1996. Las extraordinarias propiedades eléctricas y mecánicas de estos nuevos materiales, así como su uso potencial en aplicaciones tales como los Nano Electro Mechanical Systems (NEMS) o incorporándose en la formación de nuevos materiales compuestos, han impulsado el número de estudios tanto teóricos como experimentales en ciencia e ingeniería. Sin embargo, el número de publicaciones al respecto es bastante menor que el de las otras dos nanoestructuras que se estudian en este trabajo.



*Figura 1. Robert Curl, Sir Harold Kroto y Richard E. Smalley*

Los Nanotubos de Carbono fueron descubiertos en 1991 por el físico Japonés Sumio Iijima [2] y desde entonces han atraído gran interés entre la comunidad científica a causa de sus propiedades únicas. Los Nanotubos de Carbono tienen numerosas aplicaciones en el ámbito de la ingeniería debido a sus excepcionales propiedades mecánicas, físicas, electrónicas y térmicas. Además de las características que poseen este tipo de estructuras en sí mismas, también se han utilizado como “elementos de aporte” en la fabricación de materiales compuestos, demostrándose que la dispersión de estos nanomateriales en una matriz producen una mejora notable en las propiedades de estos composites [3].



*Figura 2. Sumio Iijima*

En el año 2010 los investigadores Konstantín Novosiólov y Andréy Gueim reciben el Nobel de Física por sus innovadores experimentos con respecto al Grafeno [4]. El Grafeno es una material bidimensional con excelentes propiedades, sobre todo, en el campo de la electrónica, donde se le considera el sucesor del silicio.



*Figura 3. Andréy Gueim y Konstantín Novosiólov*

Muchas son las áreas donde se proyecta el empleo de las nanoestructuras, destacando: Electrónica, Sensores, Instrumentación científica, Fotónica, Materiales, Biotecnología, Química, Energía y Mecánica.

Algunos ejemplos de aplicaciones son:

- **Sensores.** Los sensores son dispositivos que varían su comportamiento bajo la acción de determinadas cargas, lo que permite medir magnitudes físicas como fuerza, temperatura, presión, etc. Los Nanotubos de Carbono pueden ser empleados como sensores mecánicos, ya que una fuerza que actúa sobre el mismo, provoca pequeños desplazamientos en su estructura atómica lo que se traduce en una alteración de sus propiedades eléctricas. También pueden emplearse como sensores térmicos, ya que una variación de la temperatura

genera vibraciones atómicas en el Nanotubo provocando un aumento de las colisiones entre los electrones, es decir, dificultando sus movimientos.

- Las nanoestructuras pueden ser la base para la formación de nuevos materiales. Al mezclarse con otros materiales para formar nano compuestos.
- Los Nanotubos de Carbono pueden ser usados como lubricantes sólidos para disminuir el desgaste y la fricción de dos materiales en contacto. Su elevado modulo elástico ofrece la posibilidad de una superficie de contacto mínima. [5]
- Recubrimientos con pinturas que poseen nanoestructuras, se están empleando para proteger los cascos de los barcos de la contaminación biológica.
- Debido a sus características electrónicas, una de las aplicaciones más avanzadas de los Fullerenos esféricos es su uso en células solares. Pinturas compuestas por fullerenos pueden ser aplicadas sobre cualquier superficie y se convierten en fotovoltaicas, generando electricidad pero integradas en el entorno.
- El campo de los NEMS explora el comportamiento de los dispositivos mecánicos cuyas dimensiones se encuentran en la escala nanométrica.

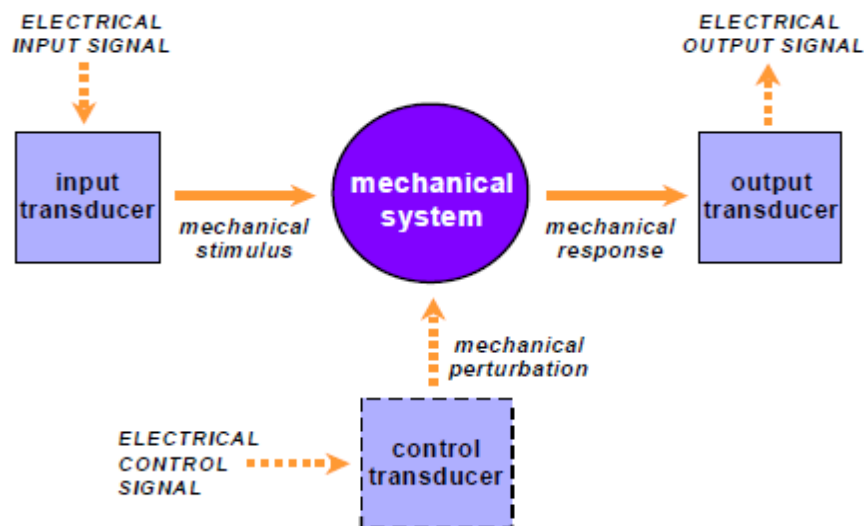


Figura 4. Esquema funcionamiento NEMS [6].

La mayoría de los trabajos sobre los NEMS empleaban dispositivos fabricados a partir de materiales a escala mesoscópica que eran modelados mediante litografía para crear estructuras como ménsulas y vigas (cantilever y bridged) [7]. Debido a los significativos avances en la manipulación y los conocimientos de sus propiedades electromecánicas, los Nanotubos de Carbono se han convertido en los principales bloques de construcción para la próxima generación de NEMS.

Algunos ejemplos de NEMS son los siguientes:

- Nano Pinzas. Se trata de colocar dos Nanotubos de Carbono en paralelo y aprovechar su respuesta cuando se someten a fuerzas electrostáticas. Como se puede observar en la figura 5, al aumentar el potencial al que se ven sometidos, se deforman produciéndose el contacto para un potencial determinado.
- Motores Rotacionales. Consiste en la colocación de una pequeña placa de material metálico que funciona como rotor, sostenida transversalmente por un Nanotubo de Carbono y rodeada por tres electrodos que actúan como estator. Aplicando cuatro señales independientes, una a la placa metálica y tres en los estatores se consigue el control de la posición, velocidad y dirección de la rotación del rotor. El componente clave del dispositivo es el Nanotubo de Carbono, ya que tiene importantes funciones: Servir de soporte para el rotor, permitir la alimentación eléctrica al rotor y habilitar la rotación del mismo.
- Nano Palancas. En este caso se trata de emplear al Nanotubo de Carbono como un interruptor. Haciendo uso de un Nanotubo de Carbono empotrado en un extremo y libre en el otro, se aprovecha su deformación al ser sometido a un potencial eléctrico que hace que contacte con la placa inferior cerrando el circuito con lo que se permite el paso de corriente eléctrica [8].

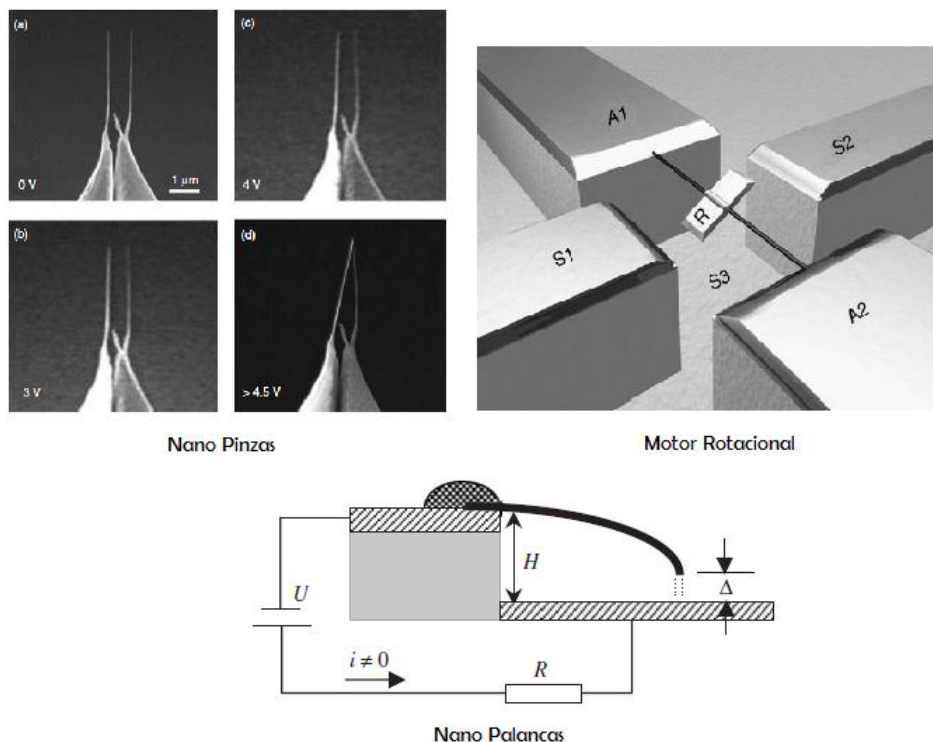
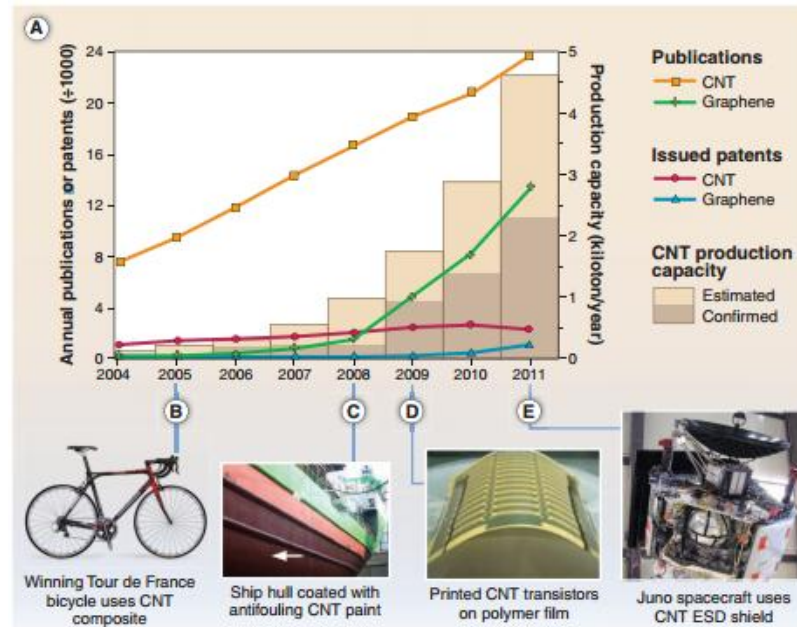


Figura 5. NEMS [8]

El auge de estas nuevas estructuras requiere del desarrollo de métodos que permitan analizar sus propiedades de manera fiable. En la Figura 6 se aprecia la tendencia creciente tanto en número de publicaciones de estudios sobre Nanotubos de Carbono como de Grafeno, así como el incremento en la capacidad de producción industrial de los mismos.



**Fig. 1.** Trends in CNT research and commercialization. (A) Journal publications and issued worldwide patents per year, along with estimated annual production capacity (see supplementary materials). (B to E) Selected CNT-related products: composite bicycle frame [Photo courtesy of BMC Switzerland AG], antifouling coatings [Courtesy of NanoCyl], printed electronics [Photo courtesy of NEC Corporation; unauthorized use not permitted]; and electrostatic discharge shielding [Photo courtesy of NanoComp Technologies, Incorporated].

Figura 6. Publicaciones, producción y ejemplos de aplicación de CNTs [9]

La realización de experimentos cuando se trabaja en la nanoescala es una tarea complicada dada la imposibilidad de controlar todos los parámetros. Además, el empleo de simulaciones basadas en la dinámica molecular (DM), requieren de elevados costes computacionales. Todo ello ha favorecido que los modelos teóricos y matemáticos se hayan convertido en importantes herramientas a la hora de realizar análisis mecánicos de nanoestructuras [10].



## 1.2 Objetivos

En este trabajo se plantean los siguientes objetivos:

- Realizar una revisión bibliográfica sobre las nanoestructuras de simple capa basadas en el carbono, destacando el Grafeno, los Nanotubos de Carbono y los Fullerenos Esféricos.
- Implementar en el código comercial de Elementos Finitos Abaqus/Standard un modelo numérico que permita el estudio dinámico de estas nanoestructuras de carbono de simple capa.  
Dicho modelo numérico se incluye en el campo de los Modelos Discretos, donde los enlaces entre átomos de carbono se modelizan mediante elementos tipo barra, y los átomos como masas concentradas.  
Para la realización de este modelo, es necesario:
  - Implementar un código en MatLab que permita la exportación de cada una de las geometrías en un archivo con extensión .inp.
  - Analizar, mediante Abaqus/Standard, el archivo generado previamente para la obtención de frecuencias y modos propios de vibración.
- Presentar expresiones analíticas para la obtención de frecuencias propias para mono capas de Grafeno y Fullerenos Esféricos.

## 1.3 Estructura del documento

Este apartado es un avance de la información contenida en cada uno de los capítulos que conforman esta memoria.

- Capítulo 2: Conceptos generales.

Se trata de una introducción teórica al mundo de los nanomateriales, a la química del carbono y los modelos de análisis empleados para el estudio de nanoestructuras.

- Capítulo 3: Antecedentes.

Se abordan las tres nanoestructuras basadas en el carbono que se estudian en el presente trabajo. Se realiza una revisión detallada de sus geometrías y se presentan resultados para el Grafeno y para los Nanotubos de Carbono. Dichos resultados se corresponden con el módulo de elasticidad y cortadura que han sido obtenidos por otros autores.

- Capítulo 4: Descripción del modelo propuesto

Se aborda el proceso utilizado para hacer uso del modelo propuesto. Se detalla el código de pre-proceso y el proceso de cálculo.



- Capítulo 5: Validación.

Con la finalidad de validar y calibrar el modelo implementado, se comparan los resultados obtenidos con otros encontrados en la literatura.

- Capítulo 6: Resultados.

Se presentan los resultados obtenidos para nuevas configuraciones y nanoestructuras no desarrolladas hasta el momento con este tipo de modelos.

- Capítulo 7: Conclusiones y trabajos futuros.

Se presentan las conclusiones tras la realización del trabajo, además de señalar posibles vías de trabajo futuras.

## 1.4 Planificación

Con el fin de cumplir los objetivos propuestos se han seguido distintas etapas en la elaboración de este proyecto:

1. Búsqueda y lectura de información referida a la geometría de nanoestructuras y modelos empleados para su estudio.
2. Elaboración de un código numérico en MatLab que permita la generación de Nanotubos de Carbono y mono capas de Grafeno.
3. Calibración del modelo mediante estudio de los resultados obtenidos en el software de elementos finitos Abaqus.
4. Generación de un código numérico en MatLab que permita la generación de Fullerenos Esféricos.
5. Simulación de todos los casos a estudio, recopilación de resultados y comparación con otros autores.
6. Conclusiones.
7. Elaboración de este documento.

	2013			2014								
	Oct	Nov	Dic	Ene	Feb	Mar	Abr	May	Jun	Jul	Ago	Sept
Búsqueda y lectura de información												
Elaboración de código CNTs- Graf												
Calibración Modelo												
Elaboración de código Fullerenos												
Simulación												
Conclusiones												
Elaboración del documento												

Tabla 1. Planificación

## 1.5 Presupuesto

Se procede a estimar el coste que supone la elaboración de este proyecto. Para ello, es necesario valorar tanto los costes personales, como los materiales e indirectos.

Los costes personales se asocian a un salario mensual de 1600 €. La dedicación diaria en promedio se establece como un 40% del total, siendo el total una jornada laboral de 8 horas diarias, lo que equivale a 3.2 horas diarias.

Los costes materiales que se tienen en cuenta son el ordenador empleado y las licencias de los programas informáticos MatLab y Abaqus. Se aplica la siguiente fórmula de amortización para calcular los costes:

$$\text{Coste de amortización} = \frac{A}{B} \cdot C \cdot D \quad (1)$$

Donde  $A$  es el número de meses que se utiliza el equipo,  $B$  el periodo de depreciación (12 meses para la licencia y 60 meses para el ordenador),  $C$  el coste del equipo y  $D$  el porcentaje de uso dedicado al proyecto.

Los costes indirectos se consideran un 20% de los costes personales y materiales.

Gastos Personales					
Personal	Categoría	Dedicación(meses)	Coste/mes	Dedicación (%)	Coste total (euros)
1	Ingeniero	9	1600	40	5760

Tabla 2. Gastos Personales.

Gastos Materiales					
Equipo	Coste (Euros)	% uso proyecto/día	Periodo de uso (meses)	Periodo de depreciación (meses)	Coste total (euros)
Ordenador	1500	13.3	9	60	29.925
Licencia MatLab	2000	13.3	9	12	199.5
Licencia Abaqus	1054.67	13.3	9	12	105.203

Tabla 3. Gastos Materiales.

Resumen Costes	Euros
Personal	5760
Material	334.628
Indirectos	1218.9256
<b>Total</b>	<b>7313.5536</b>

Tabla 4. Resumen Costes.

La elaboración de este proyecto tiene un coste total de 7313.55 euros.

## 1.6 Entorno socio-económico.

La siguiente figura ofrece una clasificación de las distintas áreas que incorporan aplicaciones que motivan el estudio de Nanoestructuras, en este caso únicamente de Nanotubos de Carbono, en función de la madurez de la tecnología y del mercado potencial estimado.

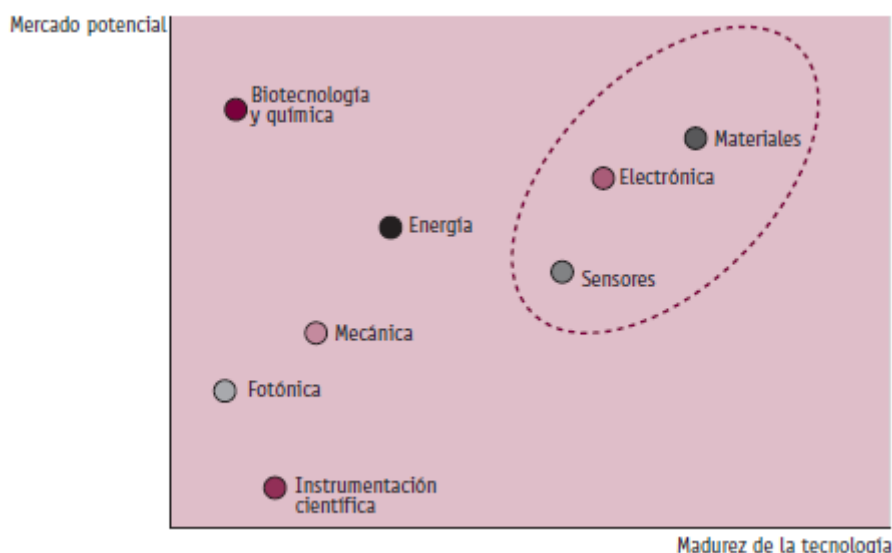


Figura 7. Mercado Potencial vs. Madurez de la tecnología.[5]

Se observa como los campos de los Materiales, Electrónica y Sensores presentan a la vez una elevada madurez de la tecnología como un alto mercado potencial. Por otro lado, el campo de la Biotecnología y Química se encuentra en un estado donde, el empleo de los Nanotubos de Carbono como suministradores de fármacos en el organismo, encuentra un muy elevado mercado potencial contrastando con una marcada inmadurez de la tecnología necesaria para hacerlo realidad [5].

El precio (en dólares Americanos) de las nanoestructuras queda recogido en las siguientes tablas, ofrecidas por la empresa “CheapTubes”.

Single Walled Carbon Nanotubes Prices	SKU #	Single Walled Carbon Nanotubes Prices in grams and kilograms						
		1g	10g	25g	50g	100g	500g	1kg
Single Walled Nanotubes 99wt% Prices	SKU 0111	250	2500	5000	7500	12,500	call	call

Tabla 5. Tabla de precios CNTs [11]

La misma empresa ofrece Fullerenos Esféricos c60 a razón de 20.000 \$ por kilo.

En la siguiente tabla queda recogida la evolución del mercado para las principales aplicaciones de Nanotubos de Carbono que generan ingresos por valor de:

Aplicación	Valoración 2006	Valoración 2007	Valoración 2011
Compuestos	\$43 M	> \$50 M	\$451.2 M
Electrónica	Despreciable	Despreciable	~ \$300 M
Energía	Despreciable	Despreciable	\$53 M

Tabla 6. Evolución del mercado



## Capítulo 2

### Conceptos Generales

## 2. Conceptos generales

### 2.1 Nanomateriales

Los nanomateriales son materiales en los que su geometría se encuentra determinada por presentar al menos una dimensión en la escala nanométrica. La escala nanométrica se encuentra entre la escala atómica (Ångström.  $10^{-10}$  metros) y la microescala (Micrómetros  $10^{-6}$  metros).

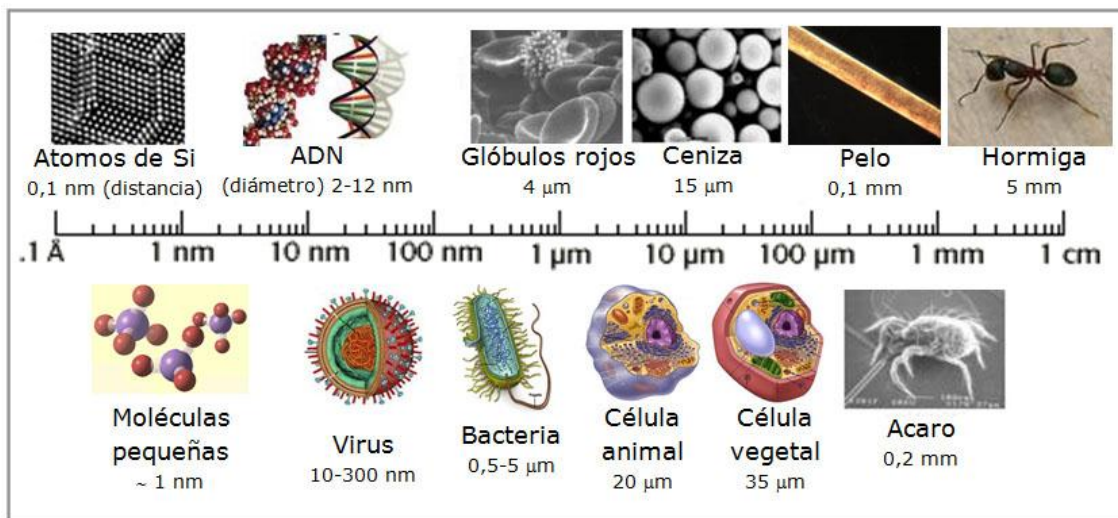


Figura 8. Escalas dimensionales. [12]

La elevada relación superficie-volumen genera la aparición de nuevos efectos mecánico-cuánticos que influyen enormemente en las propiedades químicas, físicas y biológicas del material. La nanotecnología es la encargada de estudiar y explotar el nuevo horizonte de aplicaciones que se abre como consecuencia de las nuevas propiedades presentes en los materiales.

Actualmente, se ha establecido [13] que los nanomateriales se encuentran recogidos en cuatro grandes grupos:

a. Basados en metales

Incluye puntos cuánticos, nanopartículas de oro y plata, u óxidos metálicos como el dióxido de titanio.

b. Dendrimeros

Estos nanomateriales son polímeros de tamaño nanométrico contruidos a partir de unidades ramificadas. La superficie de un dendrímero tiene numerosos extremos de cadena, que se pueden adaptar para desempeñar funciones químicas específicas. Esta propiedad se podría utilizar también para la catálisis. Además, debido a que los dendrímeros tridimensionales contienen cavidades interiores en las que se pueden introducir otras moléculas, pueden ser útiles para la administración de fármacos.

### c. Compuestos

Los compuestos combinan las nanopartículas con otras nanopartículas o con materiales de mayor tamaño.

### d. Basados en el carbono

Estos nanomateriales están compuestos mayoritariamente por carbono y suelen adoptar formas como esferas huecas, elipsoides o tubos. Los nanomateriales de carbono con forma elipsoidal o esférica se conocen como fullerenos, mientras que los cilíndricos reciben el nombre de nanotubos. [14]

## 2.2 El Carbono

El Carbono (C) es el sexto elemento de la tabla periódica. Entorno a él se extiende la química orgánica por lo que el carbono se convierte en elemento básico y necesario para la existencia de vida conocida. Se estima que, en promedio, un 20% del peso de los organismos vivos es carbono.

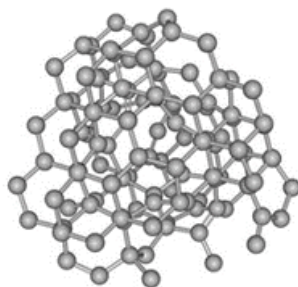
Por otro lado, el carbono es el cuarto elemento más abundante en el universo, detrás del hidrógeno, helio y oxígeno, y décimo quinto más abundante de la corteza terrestre. En La Tierra, se encuentra de forma inorgánica en piedras calizas, dolomitas, en el dióxido de carbono en el aire y depósitos orgánicos de carbón, petróleo y gas natural (combustibles fósiles).

### 2.2.1 Formas alotrópicas.

El carbono puede conformarse en varios tipos de estructuras químicas, denominadas formas alotrópicas, siendo:

#### a. Carbono amorfo

Se trata de un material opaco y negro. No presenta una estructura cristalina. Informalmente se hace referencia a él, con los nombres de carbón y hollín.

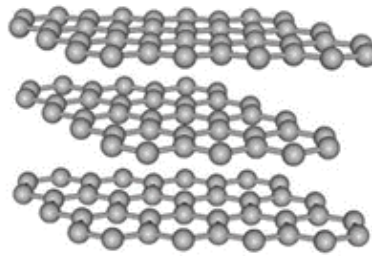


*Figura 9. Ejemplo de geometría del Carbono amorfo.*



### b. Grafito

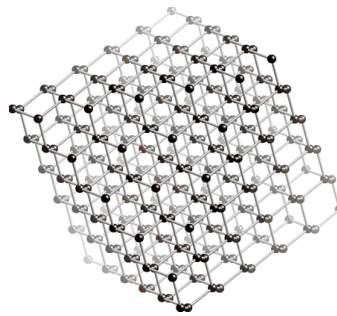
Es un material negro con brillo metálico. En esta forma es en la que se encuentra el carbono, a presión y temperatura normales, conformado por láminas de redes de dos dimensiones con enlaces covalentes muy fuertes entre sí, y uniones de Van der Waals entre las láminas.



*Figura 10. Ejemplo de geometría de grafito*

### c. Diamante

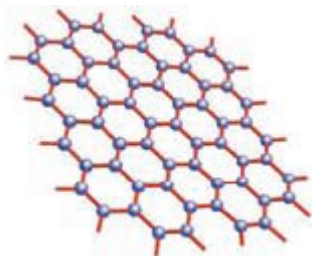
Es un material transparente formado a presiones muy altas. Está conformado por una red tridimensional de átomos, cada carbono está enlazado a cuatro carbonos formando tetraedros. [16]



*Figura 11. Ejemplo de geometría de Diamante.*

### d. Grafeno

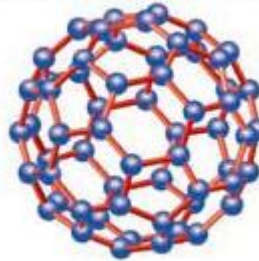
Es un material bidimensional de un átomo de espesor. Se obtiene a partir del grafito.



*Figura 12. Ejemplo de geometría de Grafeno*

e. Fullerenos esféricos o elipsoidales

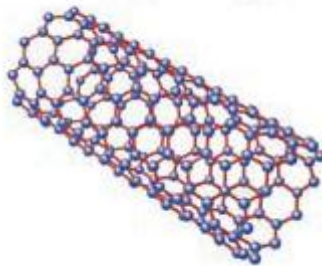
Se trata de pequeñas bolas compuestas por una red de carbonos en forma hexagonal y pentagonal.



*Figura 13. Fullerenos esféricos.*

f. Nanotubos de Carbono o Fullerenos cilíndricos.

Una descripción simplista pero bastante acertada de los mismos es: Grafeno enrollado sobre sí mismo, formando tubos de relación longitud-diámetro bastante grande.



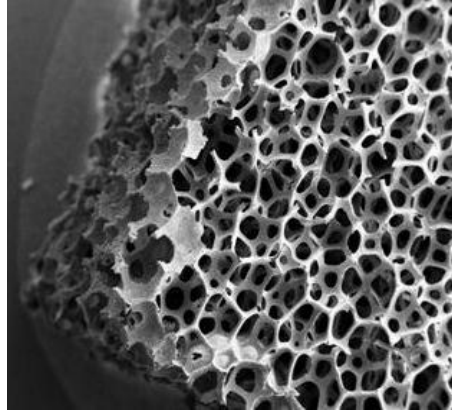
*Figura 14. Nanotubos de Carbono.*

g. Lonsdaleíta

La lonsdaleíta es un polimorfo hexagonal de carbono encontrado en meteoritos, recibe el nombre en honor de Kathleen Lonsdale. Es una forma semejante al diamante, sin embargo, hexagonal.

#### h. Carbono vítreo

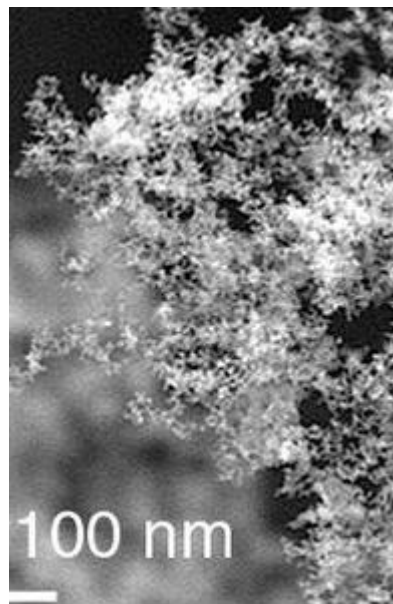
El carbono vítreo es una clase de carbono no grafitizante, que es usado ampliamente como material para electrodos en electroquímica, así como en crisoles de alta temperatura, y como componente de algunos dispositivos prostéticos.



*Figura 15. Carbono vítreo*

#### i. Nano espuma de Carbono.

Consiste en un ensamblado de cúmulos de baja densidad de átomos de carbono, mantenidos en una red tridimensional difusa. [16, 17]



*Figura 16. Nano espuma de carbono*

## 2.2.2 Enlace carbono-carbono

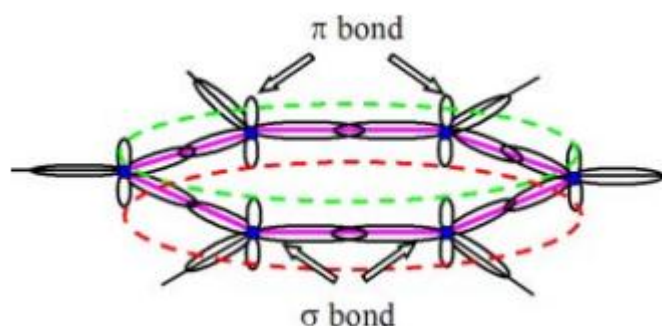


Figura 17. Representación enlace C-C

Para que sea posible el enlace carbono-carbono se tiene que dar la hibridación del átomo, esto es, la transformación de orbitales atómicos puros en orbitales atómicos híbridos [18, 19].

La configuración electrónica del carbono es  $1s^2 2s^2 2p^2$ , en todos los casos a estudio del trabajo (Grafeno, Nanotubos de Carbono y Fullerenos) la hibridación es del tipo  $sp^2$  y consiste en la combinación del orbital atómico  $2s$  y los dos orbitales  $2p$  que origina tres orbitales moleculares. Los orbitales se entremezclan de tal forma que los máximos de probabilidad de la función de onda de los electrones se localizan formando un ángulo de 120 grados.

Cada carbono está unido a otros tres carbonos quedando un orbital restante que se dispone perpendicular al plano en el que se sitúan el resto de orbitales. El electrón que se encuentra en dicho orbital está débilmente ligado, por lo que puede saltar de orbital en orbital, siendo el responsable de las propiedades electrónicas de baja energía del sistema.

La longitud de enlace, que se define como la distancia entre dos átomos iguales, equivale a 1.42 Ångström [Å].

## 2.3 Modelos existentes

### 2.3.1 Modelo Atómico (MA)

El modelo atómico centra su interés en el movimiento de los núcleos atómicos, sin prestar atención al movimiento de la nube de electrones. La fuerza total que actúa en cada átomo es la suma de las fuerzas generadas entre los electrones y las fuerzas electrostáticas generadas por los protones del núcleo. El núcleo es considerado como un punto material.

La energía potencial depende únicamente de la posición relativa de las posiciones de núcleos atómicos. El campo de fuerzas responsable del movimiento recibe el nombre de campo de fuerza molecular. En general, la energía potencial se puede describir mediante la siguiente ecuación [18]:

$$V = \sum V_r + \sum V_\theta + \sum V_\varphi + \sum V_\omega + \sum V_{vdW} + \sum V_{el} \quad (2)$$

En inglés estos términos equivalen a:

$V_r$ : bond stretching.

$V_\theta$ : bond angle bending.

$V_\varphi$ : dihedral angle torsion.

$V_\omega$ : inversión terms.

$V_{vdW}$ : Van der Walls interaction.

$V_{el}$ : electrostatic interaction.

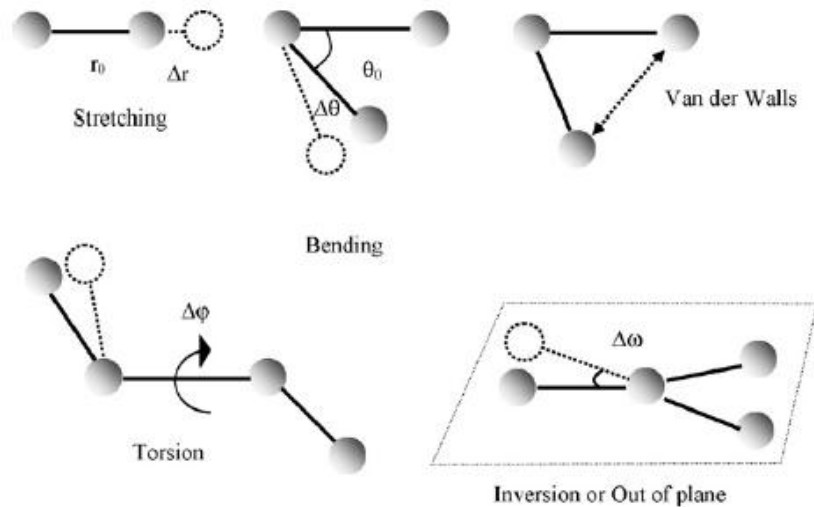


Figura 18. Esfuerzos.

### 2.3.2 Modelo Continuo (MC)

Este modelo trata a las nanoestructuras como una estructura continua a la que se le asignan unas propiedades de masa, espesor, etc. Por ejemplo, un nanotubo de carbono se puede estudiar como un tubo de pequeño espesor.

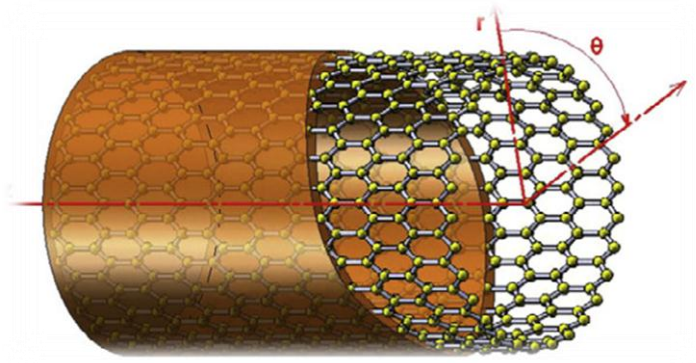


Figura 19. Modelo Continuo para CNTs.

### 2.3.3 Modelo Discreto (MD)

En contraste con el Modelo Continuo, donde toda la nanoestructura es reemplazada por un medio continuo, el modelo discreto reemplaza únicamente los enlaces carbono-carbono por elementos continuos. En otras palabras, en el modelo discreto las interacciones entre carbonos son reemplazadas por elementos estructurales cuyas propiedades son obtenidas usando el Modelo Atómico. Este modelo genera gran entusiasmo al incorporar las teorías del medio continuo a la escala nanométrica.

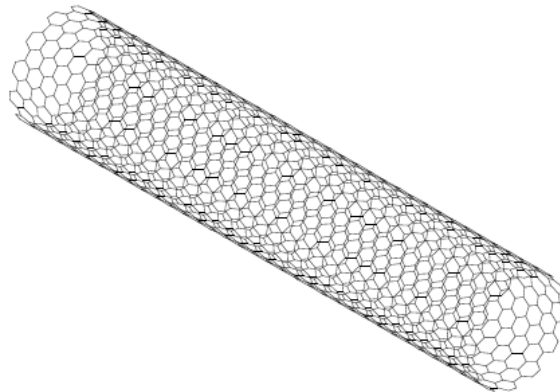


Figura 20. Modelo Discreto de un CNTs [20]

## 2.4 Propiedades mecánicas

Las propiedades mecánicas de los materiales describen el comportamiento de los mismos ante diversas sollicitaciones a los que pueden ser expuestos. Por ejemplo: fuerzas de tracción, compresión, de impacto, de fatiga o las cargas generadas por la temperatura. A continuación se definen algunas de las propiedades más comúnmente analizadas:

- Módulo de elasticidad o de Young. Rigidez material o resistencia a la deformación elástica.
- Límite elástico. Tensión a partir de la cual se produce deformación permanente.



- Resistencia a la tracción. Máxima tensión nominal que soporta un material a tracción.
- Tenacidad. Capacidad de absorber energía hasta la rotura, en deformación elástica y plástica.

En este trabajo se estudiará el Módulo de elasticidad o Módulo de Young. Dada la dificultad de realizar ensayos experimentales de laboratorio sobre nanoestructuras para obtener dicha propiedad mecánica, es necesario el empleo de resultados numéricos.

Los resultados numéricos se obtienen mediante la comparación de la nanoestructura, sobre la que se desea obtener el valor de sus propiedades, con otra estructura equivalente denominada “continuo equivalente”.

El procedimiento es el siguiente:

1. Definir la geometría de la estructura y condiciones de contorno del ensayo a simular.
2. Aplicar acciones sobre la estructura.
3. Medir las reacciones que se generan para mantener el equilibrio de la estructura.
4. Hacer uso de ecuaciones de Resistencia de Materiales para obtener el valor de las propiedades elásticas de la estructura a estudiar, para ello es necesario el conocimiento de las fuerzas y los desplazamientos.



## Capítulo 3

### Antecedentes



### 3. Antecedentes

#### 3.1 Introducción

Este capítulo consiste en una revisión bibliográfica de las nanoestructuras que se estudian en este trabajo (Grafeno, Nanotubos de Carbono y Fullerenos Esféricos) mediante la implementación de un modelo numérico que recre fielmente su geometría con el objetivo de realizar simulaciones, que desprendan resultados acordes con los obtenidos por otros autores hasta la fecha de hoy.

#### 3.2 Grafeno

##### 3.2.1 Introducción

El Grafeno es un material bidimensional que consiste en láminas de un átomo de espesor. Su geometría hexagonal viene impuesta por el tipo de enlace C-C. Se puede definir la geometría del grafeno a partir de dos vectores  $\vec{a}_1$  y  $\vec{a}_2$ . Estos vectores unen los centros de hexágonos vecinos con la particularidad de que  $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_c|$  donde  $\vec{a}_c$  es la constante de red de valor 2.46 Å. La distancia carbono-carbono equivale a 1.42 Å.

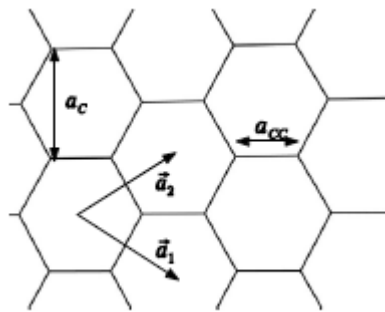


Figura 21. Red hexagonal del grafeno

Como se muestra en la siguiente figura, el Grafeno es la base de otras nanoestructuras como los nanotubos de carbono y los fullerenos esféricos.

A partir de la geometría de una lámina de Grafeno se pueden generar la geometría de un fullereno esférico formado por hexágonos y pentágonos, un nanotubo formado por hexágonos, y grafito al superponer láminas de grafeno.

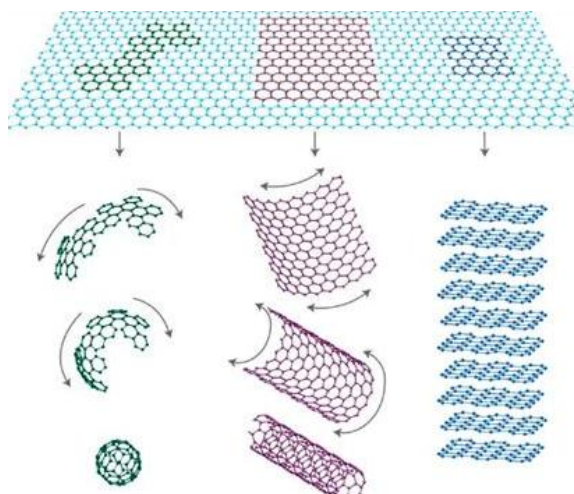


Figura 22. Formas alotrópicas del carbono.

### 3.1.2 Propiedades mecánicas

Para obtener las propiedades mecánicas, se realiza un ensayo de tracción uniaxial que consiste en fijar un desplazamiento en los nodos de uno de los extremos de la lámina de Grafeno y aplicar una condición de contorno en los nodos del extremo opuesto, esta condición de contorno consiste en impedir los movimientos en la dirección en la que tiene lugar el ensayo. Como resultado se miden las fuerzas de reacción de los nodos a los que hemos impuesto la condición de contorno y se calcula el módulo de Young, ya que tanto fuerza, como área y desplazamiento son conocidos.

En la siguiente tabla se recogen los resultados obtenidos para el módulo de Young en láminas de grafeno por algunos investigadores.

INVESTIGADOR	RESULTADO [TPA]
LI Y CHOU	0.995-1.033
KELLY	1.025
KUDIN	1.029
LIU, CHIE Y ZHANG	0.63

Tabla 7. Resultados ensayo de tracción grafeno. [22], [29]

### 3.3 Nanotubos de carbono

#### 3.3.1 Introducción

Los Nanotubos de Carbono son mallas hexagonales al igual que el Grafeno, sin embargo, se encuentran enrolladas sobre sí mismas formando tubos de diámetros pequeños en comparación con su longitud.

Las propiedades de los Nanotubos de Carbono dependen en gran medida de su geometría, esto es, de su diámetro y ángulo chiral, también llamado helicidad. Estos dos parámetros quedan completamente definidos por los índices de Hamada ( $n, m$ ).

La descripción del nanotubo se hace a partir del vector Chiral,  $\vec{C}_h$  y del vector de translación,  $\vec{a}$ . La magnitud del vector Chiral equivale al perímetro del nanotubo y se escribe como combinación lineal de los vectores primitivos:

Nota:  $n_1$  y  $n_2$  son  $n$  y  $m$ , los índices de Hamada.

$$\vec{C}_h = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 \quad (3)$$

De igual forma el vector de translación se define como:

$$\vec{a} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2 \quad (4)$$

Bajo la condición de perpendicularidad  $\vec{C}_h \cdot \vec{a} = 0$  se obtiene que  $t_1 = -(2n_2 + n_1)/nR$  y  $t_2 = (2n_1 + n_2)/nR$ , donde  $n$  es el máximo común divisor (MCD) entre  $n_1$  y  $n_2$ .  $R$  es un número entero tal que  $R=1$ , si el número  $(n_1 - n_2)$  no es múltiplo entero de  $2n$ ; o  $R=3$ , si el número  $(n_1 - n_2)$  es múltiplo entero de  $3n$ . Los dos vectores  $(\vec{C}_h, \vec{a})$  definen el nanotubo unitario, pudiéndose calcular el número de pares de átomos de carbono en el nanotubo unitario a partir de la siguiente expresión:

$$Q = \frac{|\vec{C}_h \cdot \vec{a}|}{|\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2|} = \frac{2(n_1^2 + n_2^2 + n_1 \cdot n_2)}{nR} \quad (5)$$

El radio del Nanotubo y la magnitud del vector de translación se pueden calcular, respectivamente con:

$$r = \frac{a_c}{2\pi} \sqrt{\frac{nRQ}{2}} \quad (6)$$

$$a = a_c \sqrt{\frac{3Q}{2nR}} \quad (7)$$

Este método trata entonces al Nanotubo como una malla de grafeno limitada por los vectores  $\vec{C}_h$ ,  $\vec{a}$ , la cual luego de enrollarse sobre el vector  $\vec{C}_h$  reproduce el Nanotubo unitario. [21]

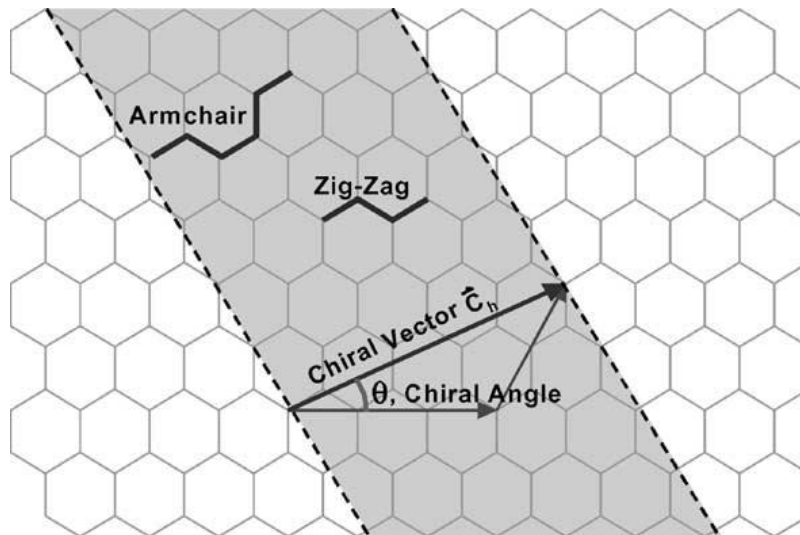


Figura 23. Vector Chiral.

Existe una clasificación de los Nanotubos atendiendo a los índices de Hamada.

- Nanotubos Armchair. Cuando ambos tienen el mismo valor  $m=n$
- Nanotubos Zigzag. Se denominan así a los nanotubos que tiene  $m=0$ .
- Nanotubos Chiral. Aquellos que cumplen que  $n > m > 0$ .

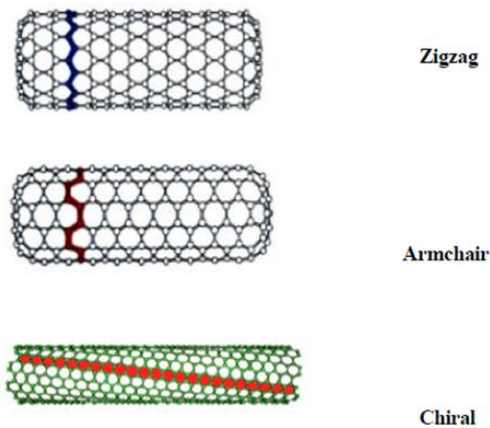


Figura 24. Tipos de nanotubos.

### 3.3.2 Propiedades mecánicas

Con el fin de obtener los módulos de elasticidad (E) y de cortadura (G) de distintos tipos de nanotubos se han realizado ensayos de tracción simple y de cortadura. También se han realizado análisis dinámicos con el objetivo de calcular sus frecuencias naturales y modos propios de vibración.

#### 3.3.2.1 Ensayo de tracción simple

Los resultados del ensayo de tracción simple en nanotubos de carbono han demostrado que la dependencia del modelo de cálculo empleado es bastante relevante al aparecer gran dispersión en el valor final del módulo de Young.

AUTOR	MODELO EMPLEADO	MÓDULO DE YOUNG [TPA]
<b>SEARS Y BATRA</b>	MC	2.52
<b>NATSUKI AND ENDO</b>	MD	0.94
<b>WANG</b>	MC	0.54-0.57
<b>XIAO ET AL.</b>	MC	1.20
<b>ZHANG ET AL.</b>	MA	1.08
<b>TSERPES Y PAPANIKOS</b>	MD	2.37
<b>KALAMKAROV ET AL.</b>	MC	1.71
<b>AGRAWAL ET AL.</b>	MA	0.55-0.75
<b>MEO Y ROSSI</b>	MD	0.912-0.920
<b>PAPANIKOS ET AL.</b>	MC	0.4-2.08
<b>ÁVILA Y LACERDA</b>	MD	0.95-5.5

Tabla 8. Resultados Ensayo de tracción simple CNTs [3]

#### 3.3.2.2 Ensayo de cortadura

El ensayo de cortadura tiene como objetivo obtener el módulo elástico transversal o módulo de cortadura.

AUTOR	MÓDULO DE CORTADURA [TPA]	
	Armchair	Zigzag
<b>TSERPES Y PAPANIKOS</b>	0.381-0.485	0.283-0.487
<b>NIKOLOPOULOS ET AL.</b>	0.39-0.48	0.23-0.46

Tabla 9. Módulo de Cortadura [3]

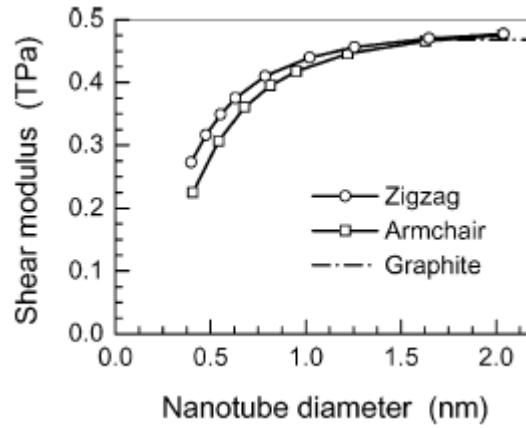


Figura 25. Módulo de cortadura vs Diámetro [22]

### 3.3.3 Vibraciones

Para hallar las frecuencias naturales mediante un análisis dinámico se procede a resolver un problema de auto valores que adaptado al método de elementos finitos equivale a:

$$(-\omega^2 M^{MN} + K^{MN})\varphi^N = 0 \quad (8)$$

Donde:  $M^{MN}$  es la matriz de masas, la cual se trata de una matriz simétrica y positiva;  $K^{MN}$  es la matriz de rigidez;  $\varphi^N$  es el autovector (el modo de vibración) y  $M, N$  son los grados de libertad.

De los tres métodos de extracción de auto valores que ofrece Abaqus emplearemos únicamente Lanczos, que se corresponde al método tradicional de extracción de auto valores por defecto [22].

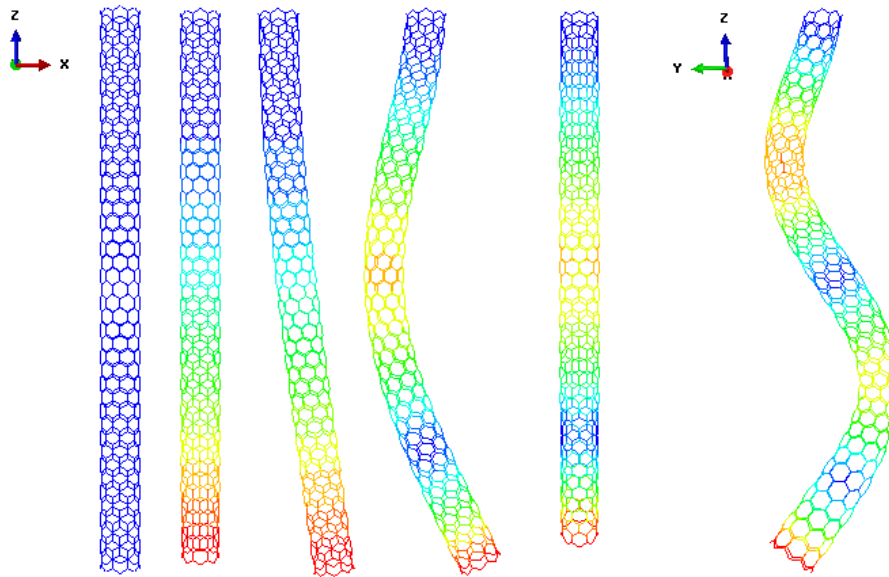


Figura 26. Cinco primeros Modos propios para CNTs

### 3.4 Fullerenos esféricos

Los Fullerenos reciben este nombre en homenaje a Richard Buckminster Fuller (1895-1983) famoso por sus cúpulas geodésicas, las cuales tienen una estructura parecida a la forma alotrópica del carbono que más tarde se descubriría, el Fullerenos Esférico C<sub>60</sub>.

El descubrimiento de los Fullerenos se atribuye a Curl, Kroto y Smalley en el año 1985 [1], los cuales recibirían el Premio Nobel de Química en 1996.

Los Fullerenos son estructuras con geometría esférica que se forman mediante el enlace de un carbono con otros tres carbonos, de acuerdo a la hibridación  $sp^2$ .

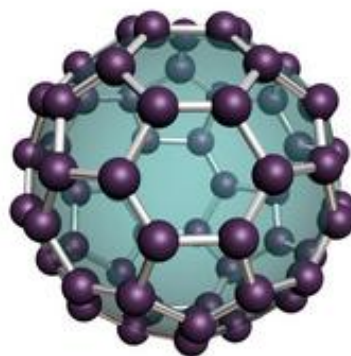


Figura 27. Ejemplo de C<sub>60</sub>.



Mediante la siguiente expresión quedan determinados el número de hexágonos y pentágonos que forman la nanoestructura en función del número de carbonos.

$$p = 12; \quad c = 2 \cdot (h + 10); \quad h = \frac{c}{2} - 10 \quad (9)$$

Sabiendo que p, h y c son el número de pentágonos, hexágonos y carbonos que forman la estructura respectivamente.

El C20 corresponde con el Fullerenos esférico más pequeño posible, ya que se compone de doce pentágonos formados por veinte carbonos. El C60, por ejemplo, se compone de doce pentágonos y veinte hexágonos.

De las tres nanoestructuras estudiadas se percibe que para los Fullerenos Esféricos la cantidad de estudios y trabajos realizados es notablemente inferior. Por ello, una vez validado el modelo desarrollado, se procede a realizar nuevas simulaciones sobre los mismos.

La utilidad de las nuevas simulaciones es presentar expresiones que permitan obtener el valor de las primeras frecuencias naturales mediante expresiones analíticas sencillas, consiguiendo de esta manera un importante ahorro de tiempo para las personas que necesiten hacer uso de ellas más adelante.





## Capítulo 4

### Descripción del modelo propuesto

## 4. Descripción del modelo propuesto

### 4.1 Introducción

Haciendo uso de la herramienta de software informático MatLab se genera la geometría de las nanoestructuras. Para ello se programa un código que permite la extracción de las coordenadas espaciales de los carbonos (nodos) y sus conectividades (elementos).

Empleando también MatLab se escribe un archivo de extensión .inp que es el mismo formato con el que trabaja el software de elementos finitos Abaqus. El archivo generado se trata de un mallado huérfano, es decir, que es imposible su edición más adelante.

De la forma en que asignamos las propiedades a las geometrías creadas, sitúan nuestro modelo en el grupo de los denominados Modelos Discretos.

Se recuerda que un Modelo Discreto es aquel en el que se procede a la discretización de la estructura a estudio mediante nodos y elementos, a los que se les asignan unas propiedades mecánicas determinadas.

Finalmente, se carga este archivo en el programa de Elementos Finitos empleado en el trabajo y se realiza el análisis deseado.



*Figura 28. Procedimiento.*

### 4.2 Código de Preproceso

El código de Preproceso se obtiene usando el Software informático MatLab. Para ello, se programa un código capaz de generar la geometría de las nanoestructuras. Finalmente, se extrae la información necesaria para crear el archivo de entrada empleado en la fase de simulación.

El código es distinto para cada una de las nanoestructuras a estudiar. Sin embargo, todos tienen el mismo objetivo: Obtener una matriz con las coordenadas de cada uno de los carbonos y otra matriz que haga referencia a los enlaces entre los mismos.

Obtenidas dichas matrices, se procede a escribir un archivo de extensión .inp (Input File) que será el archivo que contenga la información para que el programa de Elementos Finitos sea capaz de leerlo y se genere así la estructura con la que vamos a trabajar.

### ■ Grafeno

La geometría del Grafeno se obtiene de forma radicalmente diferente a las otras dos nanoestructuras que se estudian en este trabajo.

Sabiendo que el Grafeno se compone mediante la repetición de hexágonos con una posición muy determinada, se procede a estudiar geométricamente estos hexágonos.

Haciendo uso de bucles se crean, fila a fila, todos los hexágonos que dan lugar a la geometría del Grafeno.

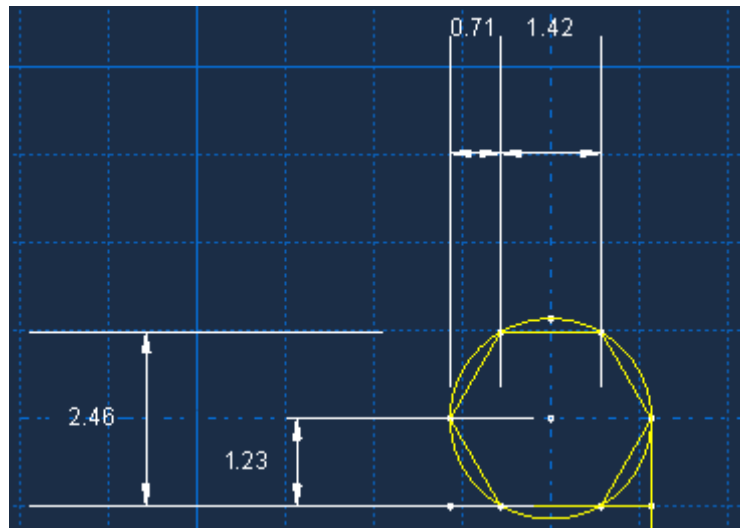


Figura 29. Análisis geométrico de una celda hexagonal.

Con todos los átomos de carbono dispuestos en el plano se procede a seleccionar aquellos que se encuentran enlazados mediante enlaces covalentes. Para ello, se tiene en cuenta que cada carbono enlaza con otros tres carbonos, así como la distancia interatómica permitida. Como resultado queda definida la matriz de conectividades.

Finalmente, se procede a crear el archivo .inp que contiene esta información.

En el Anexo 1 se encuentra el código empleado.

### ■ Nanotubos de Carbono

Editando el código proporcionado por [24] se procede a la creación de uno nuevo, más útil para nuestro estudio. Inicialmente, el código empleaba las ecuaciones descritas en el apartado 3.3.1 y desprendía como resultado imágenes de tubos mallados.

El trabajo realizado sobre el mismo consiste en convertirlo en un código más claro para el lector y útil para el estudio que se procede a realizar.

Con ello se consigue generar la geometría de Nanotubos de Carbono, a partir de tres parámetros: Los índices de Hamada ( $n,m$ ) que determinan tanto el diámetro como la configuración de los mismos (Armchair o Zigzag), y de la longitud aparente del nanotubo.

Se hace referencia a longitud aparente del Nanotubo, pues la manera en la que el código enrolla las láminas, puede cortar redes hexagonales. Nuestro código corrige el error reduciendo su longitud hasta que las mismas quedan perfectamente completas (seis carbonos). Finalmente, medimos el valor real tanto de longitud como de diámetro.

Para terminar, se genera el archivo .inp que contiene esta información.

En el Anexo 2 se encuentra el código empleado.

- Fullerenos Esféricos

Para construir la geometría de los Fullerenos hacemos uso de archivos que contienen coordenadas de los nodos de los distintos tipos de Fullerenos Esféricos [25].

El código programado en MatLab toma el valor de estas coordenadas y genera las conexiones posibles entre los carbonos, de forma similar a la manera de operar con los Nanotubos de Carbono.

Finalmente, se genera el archivo .inp que contiene esta información.

En el Anexo 3 se encuentra el código empleado.

## 4.3 Proceso de cálculo

### 4.3.1 Introducción

Todos los análisis de Elementos Finitos se componen de tres fases:

1. Pre-procesamiento o modelado: En esta fase se crea el archivo de entrada que contiene el diseño a estudiar. Esta fase se puede realizar tanto en Abaqus como en otros programas e importar después el archivo de salida a Abaqus, que es lo que ocurre en nuestro caso.
2. Proceso, evaluación o simulación: En esta fase se resuelve el problema de Elementos Finitos. El proceso de cálculo se realiza íntegramente por el programa de Elementos Finitos Abaqus.
3. Post-proceso y generación de informe: En la última fase se presentan los resultados obtenidos.

### 4.3.2 Propiedades mecánicas

El modelo discreto necesita tener asignado en sus elementos las propiedades mecánicas responsables del comportamiento de la estructura. El tipo de elemento seleccionado para suplir a las nubes electrónicas y fuerzas de tipo electromagnético que mantienen

unidos los átomos de carbono en la red de la nanoestructura se denomina “equivalent beam”.

El trabajo de otros autores [27] ha permitido desarrollar unas ecuaciones que relacionan los parámetros de la mecánica molecular con la mecánica estructural.

$$\frac{E_b A_b}{l} = k_r, \quad \frac{E_b I_b}{l} = k_\theta, \quad \frac{G_b J_b}{l} = k_\varphi \quad (10)$$

Donde  $l$  es la longitud de enlace entre carbonos,  $E_b$  y  $G_b$  son el módulo de Young y el módulo de cortadura.  $I_b$  y  $J_b$  son el momento de inercia y el momento polar de inercia.  $k_r$ ,  $k_\theta$  y  $k_\varphi$  son las rigideces a axil, flexión y torsión. Por otro lado, se asumen los enlaces como un sólido macizo de sección circular, estando definidas por lo tanto sus propiedades geométricas a partir de las siguientes expresiones, donde  $d$  es el diámetro de dicha sección circular:

$$A_b = \frac{\pi d^2}{4}, \quad I_b = \frac{\pi d^4}{64}, \quad J_b = \frac{\pi d^4}{32} \quad (11)$$

Con ello obtenemos, los parámetros que definen nuestros elementos:

$$d = 4 \sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}}, \quad E_b = \frac{k_r^2 l}{4\pi k_\theta}, \quad G_b = \frac{k_r^2 k_\tau l}{8\pi k_\theta^2} \quad (12)$$

Tomando los valores de las rigideces que se desprenden de estudios realizados por otros autores [20,26]:

$$\begin{aligned} k_r &= 6.52 \times 10^{-7} \text{ N/nm} \\ k_\theta &= 8.76 \times 10^{-10} \text{ Nnm/rad}^{-2} \\ k_\tau &= 2.78 \times 10^{-10} \text{ Nnm/rad}^{-2} \end{aligned}$$

Podemos finalmente hallar los valores para los parámetros que definen a los elementos “equivalent beam” del modelo:

$$\begin{aligned} d &= 0.147 \text{ nm} \\ r &= 0.0733 \text{ nm} \\ E_b &= 5487 \text{ nN/nm}^2 = 5487 \text{ GPa} \\ G_b &= 870 \text{ nN/nm}^2 = 870 \text{ GPa} \end{aligned}$$

#### 4.3.2.1 Elemento Tipo Beam

En todos los problemas de Elementos Finitos es necesario asignar a los elementos las propiedades que determinan su comportamiento frente las acciones a los que se verán sometidos.

Un elemento tipo Beam consiste en un segmento que une dos nodos al que se le asigna una sección y propiedades mecánicas determinadas. Abaqus posibilita la creación de dos tipos de elementos Beam:

- Truss: Se trata de una barra articulada en sus extremos, es decir, el elemento solo es capaz de transmitir esfuerzo axial.
- Beam: Se trata de una barra reticulada, es decir, presenta seis grados de libertad en sus extremos. Tres grados de libertad en desplazamiento y tres en rotación. Por tanto, soporta esfuerzos axiales, torsores, cortantes y flectores.

En este trabajo se emplean, en todo momento, elementos Beam.

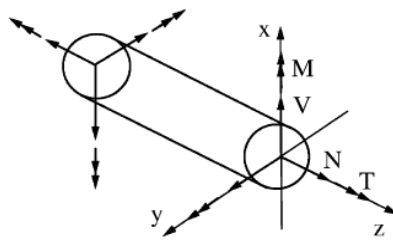


Figura 30. Elemento tipo Beam.

#### 4.3.2.2 Masas concentradas en los nodos

Para simular los átomos de carbono se considera un modelo de masas concentradas en los nodos. Se asume por tanto que la masa de la nube de electrones que forma el enlace es insignificante en comparación con el núcleo del átomo.  $m_c = 1.9943 \times 10^{-26}$  Kg

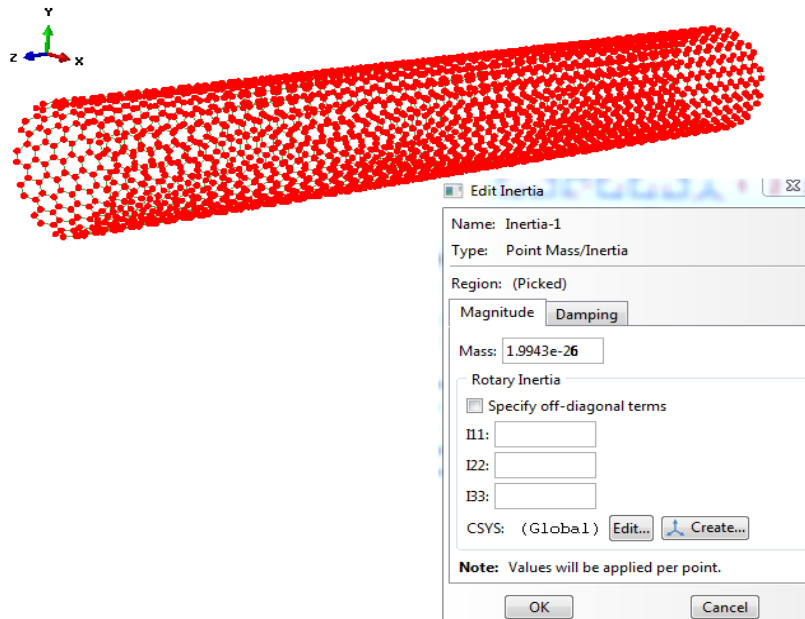


Figura 31. Masas concentradas en los nodos.

#### 4.3.3 Condiciones de contorno.

Las condiciones de contorno son las coacciones que se pueden asignar a algunos nodos de las estructuras para impedir determinados movimientos o giros. Varían en función del objetivo de la simulación a realizar.

En el estudio de las propiedades mecánicas, como puede ser la obtención del módulo de Young de Nanotubos de Carbono y láminas de Grafeno, se procederá a empotrar un extremo y a aplicar en el otro extremo desplazamientos que generarán reacciones y permiten obtener el valor numérico del Módulo de Young. Un empotramiento en un nodo impide los desplazamientos en todas las direcciones así como los giros sobre cualquier eje en ese nodo en particular.

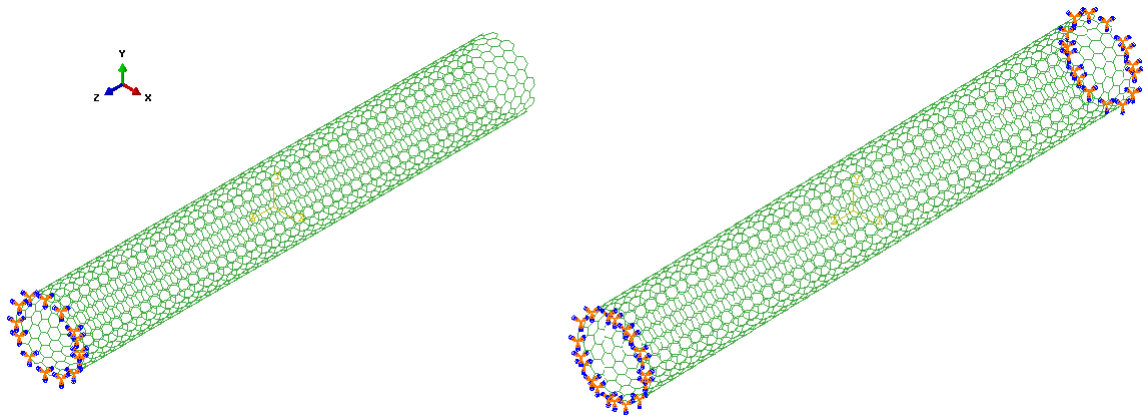
Cuando se trata de un análisis dinámico: El estudio de las frecuencias y modos propios dependerá de la nanoestructura con la que se esté trabajando.

Los Nanotubos de Carbono se estudian en dos configuraciones: Cantilever o ménsula (Empotrado en un extremo y libre en el opuesto) y Bridged o biempotrado (Empotrado

en ambos extremos). En la Figura 32 se ha realizado un esquema detallado de dichas configuraciones.

Las mono capas de grafeno se estudian en cuatro configuraciones diferentes: Empotrado en todos sus extremos, libre en uno solo de sus extremos, empotrado en uno solo de sus extremos, empotrado en extremos opuestos. Además, se incluye una imagen de una mono capa de Grafeno libre en todos sus extremos. (Ver Figura 33)

Los Fullerenos esféricos se estudiarán para el caso en el que se encuentren sin ningún tipo de coacción en sus nodos como puede verse en la Figura 34.



*Figura 32. Condiciones de contorno CNTs*



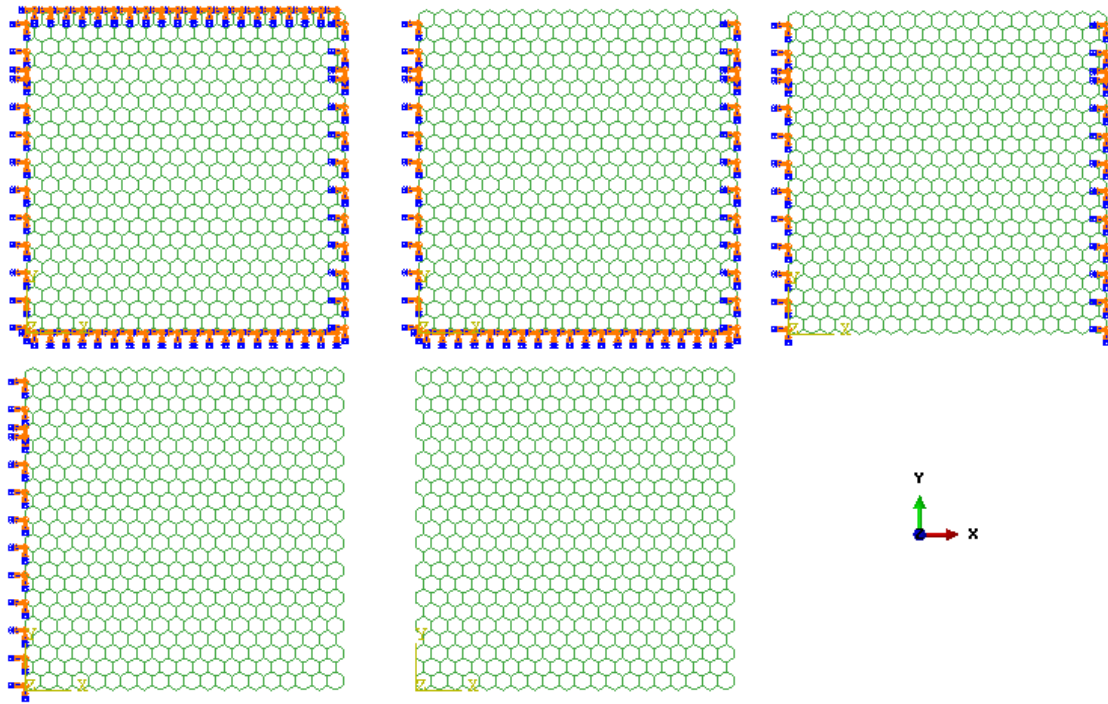


Figura 33. Condiciones de contorno de Grafeno

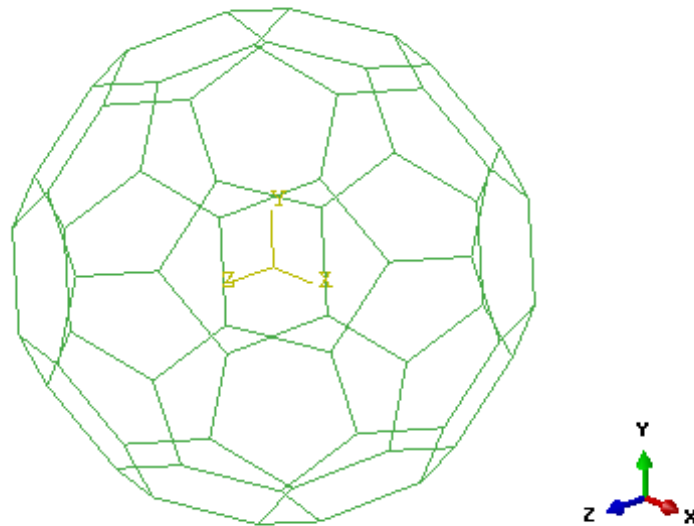


Figura 34. Condiciones de contorno Fullerenos.



## Capítulo 5

### Validación del modelo

## 5 Validación del modelo.

Con la finalidad de validar el modelo numérico desarrollado, se han calculado las propiedades mecánicas del Grafeno y CNT, comparándolas con resultados obtenidos por diversos autores. Del mismo modo, se ha realizado un análisis de frecuencias y modos propios para mono capa de Grafeno.

### 5.1 Cálculo de propiedades mecánicas

#### 5.1.1 Grafeno

Simulando un ensayo de tracción uniaxial sobre una lámina de Grafeno de longitud y ancho determinados obtenemos el valor del Módulo de Young de las láminas de Grafeno para nuestro modelo propuesto, que posteriormente se compararán con resultados de la bibliografía existente.

Se procede a generar la geometría deseada, aplicar las propiedades a los elementos y definir las condiciones de contorno. En todos los casos, se encuentra empotrado un extremo de la lámina y en el extremo opuesto imponemos un desplazamiento de valor 0.1 nm (ver Figura 35).

Como resultado obtenemos el valor de las fuerzas de reacción en cada uno de los nodos del extremo empotrado.

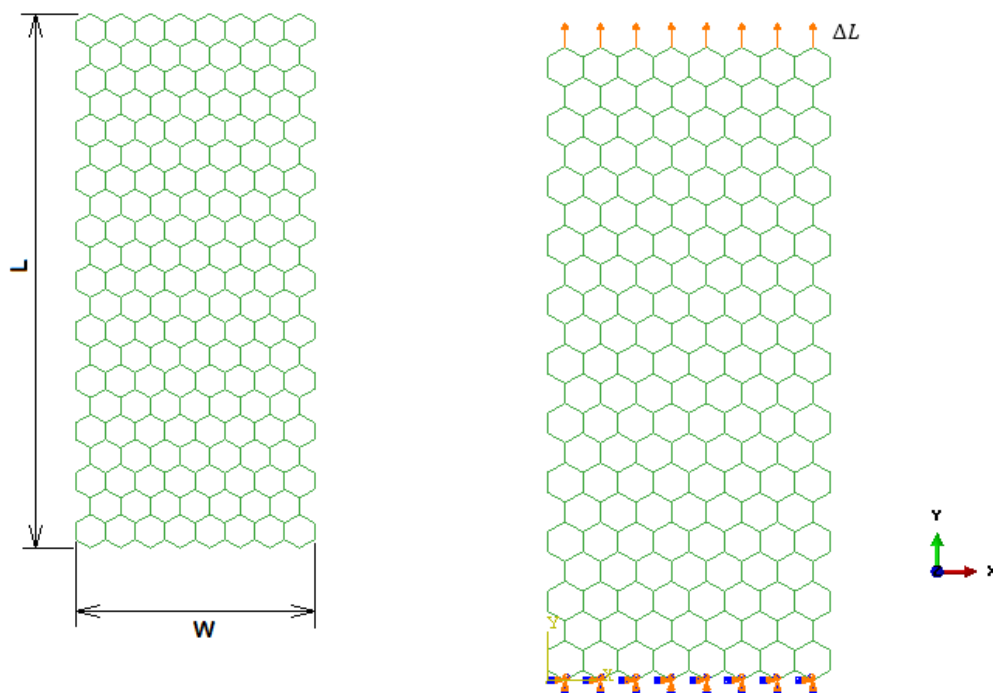


Figura 35. Esquema de un ensayo a tracción simple.

Por último, mediante la ecuación (13), se obtiene el valor del Módulo de Young, siendo calculado a partir de una placa continua equivalente a la lámina de grafeno, tal y como se representa en la figura 36. Por lo tanto

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{\frac{F}{A_0}}{\frac{\Delta L}{L_0}} = \frac{F L_0}{W t \Delta L} \quad (13)$$

donde  $F$  es la reacción vertical en los nodos del empotramiento,  $L_0$  es el valor de la longitud inicial de la lámina de grafeno,  $W$  es el valor de su ancho inicial, y  $t$  es el espesor que se le asocia a las láminas de grafeno. Se trata de un valor que por convenio de la mayoría de autores es 0.34 nm. Este valor equivale a la distancia interplanar en el grafito.  $\Delta L$  es el valor del desplazamiento impuesto a los nodos.

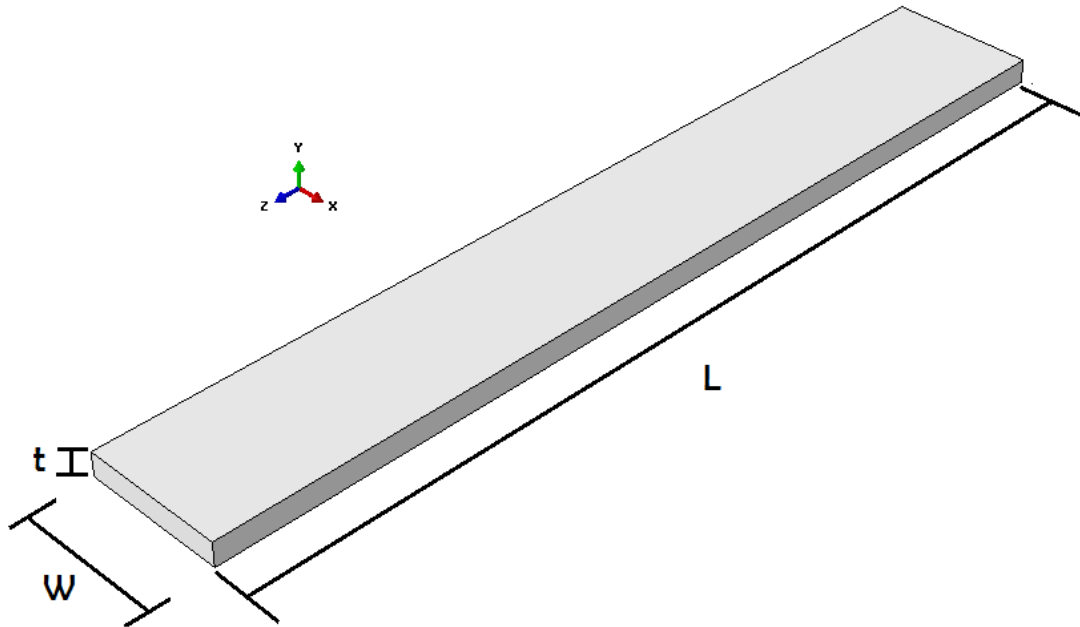
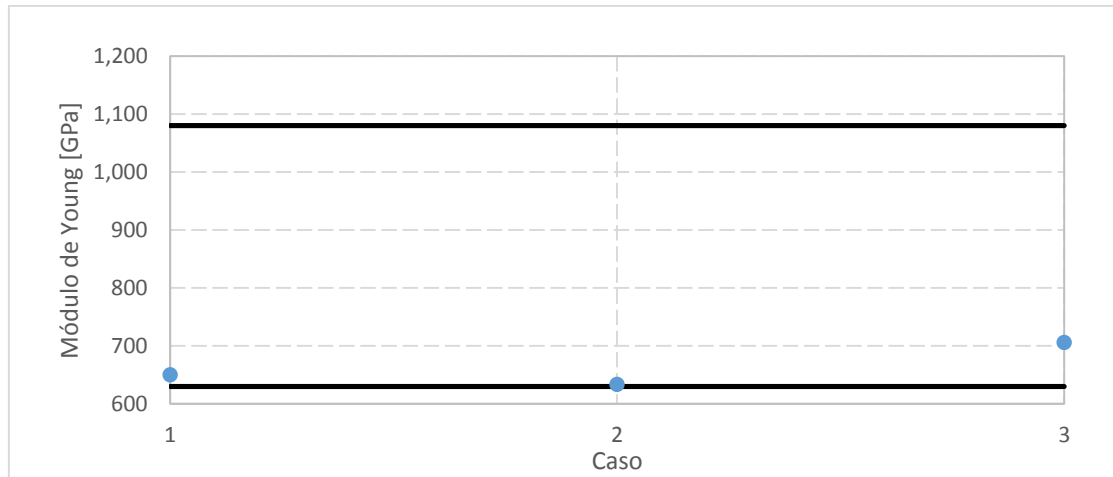


Figura 36. Placa equivalente.

Se han analizado tres geometrías diferentes de lámina de grafeno, tal y como se recoge en la tabla 10. El motivo de seleccionar estos tres casos, es debido a que los autores con los que contrastamos resultados [22] emplean estas mismas dimensiones y, por tanto, es útil para comparar resultados.

Nº CASO	Ancho [nm]	Alto [nm]
CASO 1	0.738	2.842
CASO 2	1.969	4.831
CASO 3	4.184	20.174

Tabla 10. Casos a estudio de Ensayo tracción uniaxial Grafeno



Gráfica 1. Ensayo de Tracción simple.

Las cotas inferior y superior del eje Y (que se presentan como dos líneas de color negro y horizontales) de la gráfica anterior representan los valores mínimo y máximo obtenidos por el resto de investigadores. Se observa que nuestros resultados se encuentran incluidos en el intervalo de resultados presentados hasta el momento.

### 5.1.2 Nanotubos de carbono

Simulando un ensayo de tracción uniaxial sobre un Nanotubo de Carbono de longitud y ancho determinado mediante los Índices de Hamada, obtenemos el valor del Módulo de Young. Comparamos nuestros resultados con la bibliografía existente.

Se procede a generar la geometría deseada, aplicar las propiedades a los elementos y definir las condiciones de contorno. En todos los casos, se encuentra empotrado un extremo del Nanotubo de Carbono y en el otro extremo imponemos un desplazamiento de valor 0.5 nm.

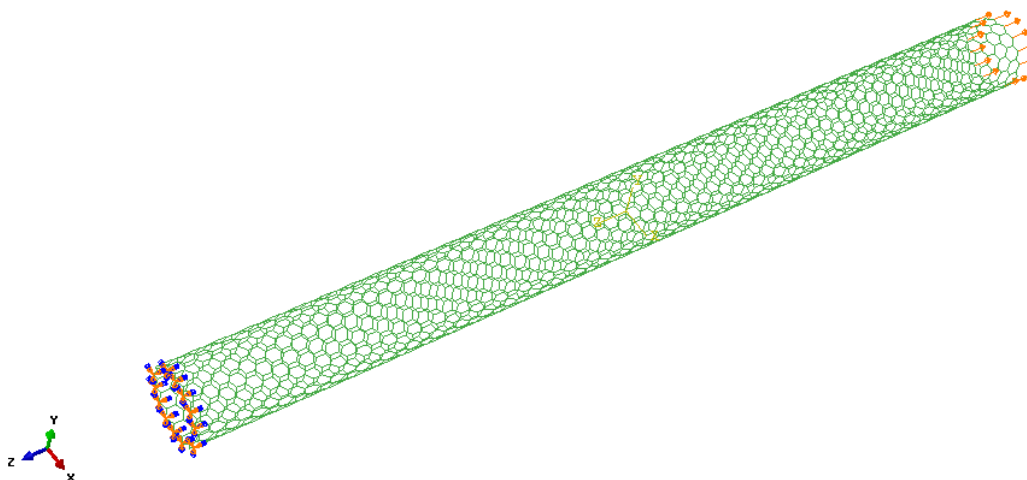


Figura 37. Ensayo de tracción CNTs.

El módulo de elasticidad se obtiene, de forma similar al caso anterior, utilizando ahora un tubo continuo equivalente, resultando la ecuación:

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{\frac{F}{A_0}}{\frac{\Delta L}{L_0}} = \frac{F L_0}{\pi D_o t \Delta L} \quad (14)$$

donde  $F$  es la reacción vertical en los nodos del empotramiento,  $L_0$  es el valor de la longitud inicial del CNT,  $D_o$  es el valor del diámetro del CNT, y  $t$  adquiere un valor de 0.34 nm.  $\Delta L$  es el valor del desplazamiento impuesto a los nodos.

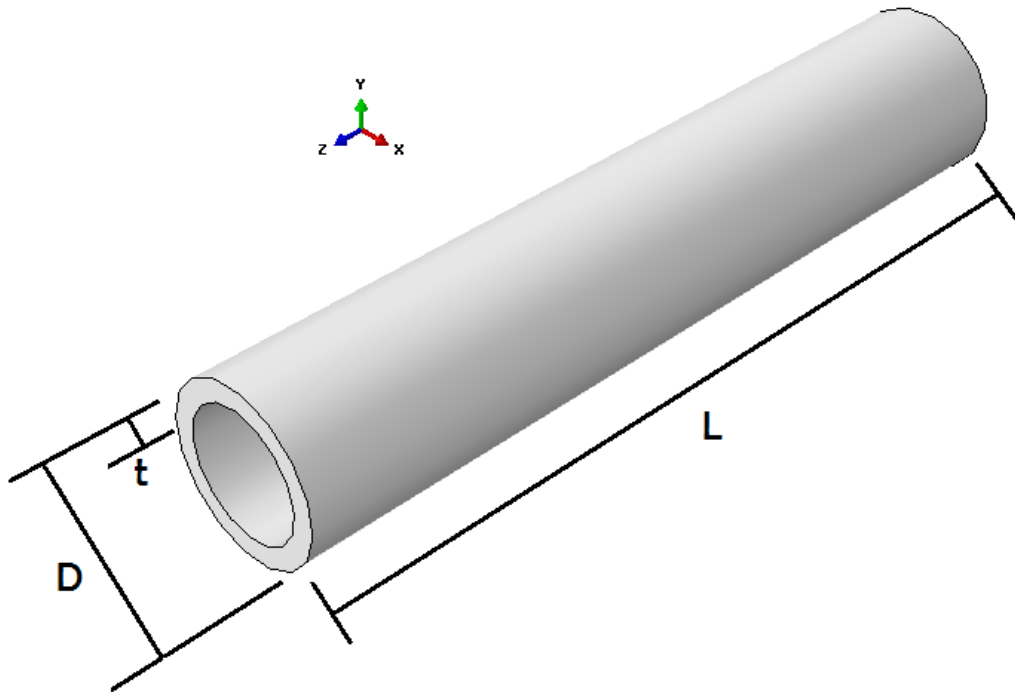
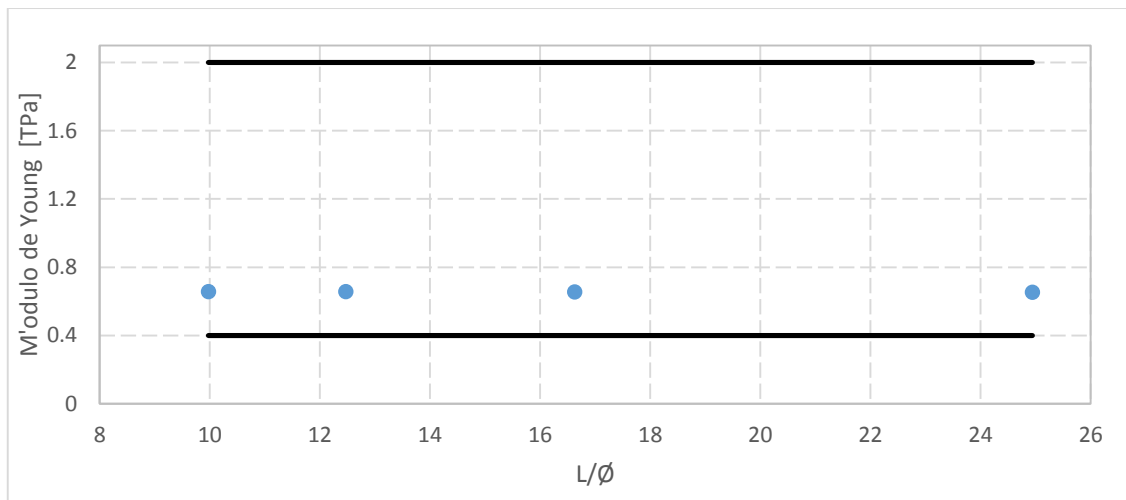


Figura 38. Esquema Tubo equivalente.

Los resultados obtenidos se recogen en la gráfica 2, donde se encuentra representado el módulo de elasticidad en TeraPascasles, frente a la relación Longitud/Diámetro, obteniendo de esta forma una variable adimensional.

De la misma forma que para el Grafeno, comprobamos como nuestros resultados quedan acotados dentro del rango de resultados ofrecidos por otros investigadores.



Gráfica 2. Valor del Módulo de Young vs Relación de aspecto. CNTs

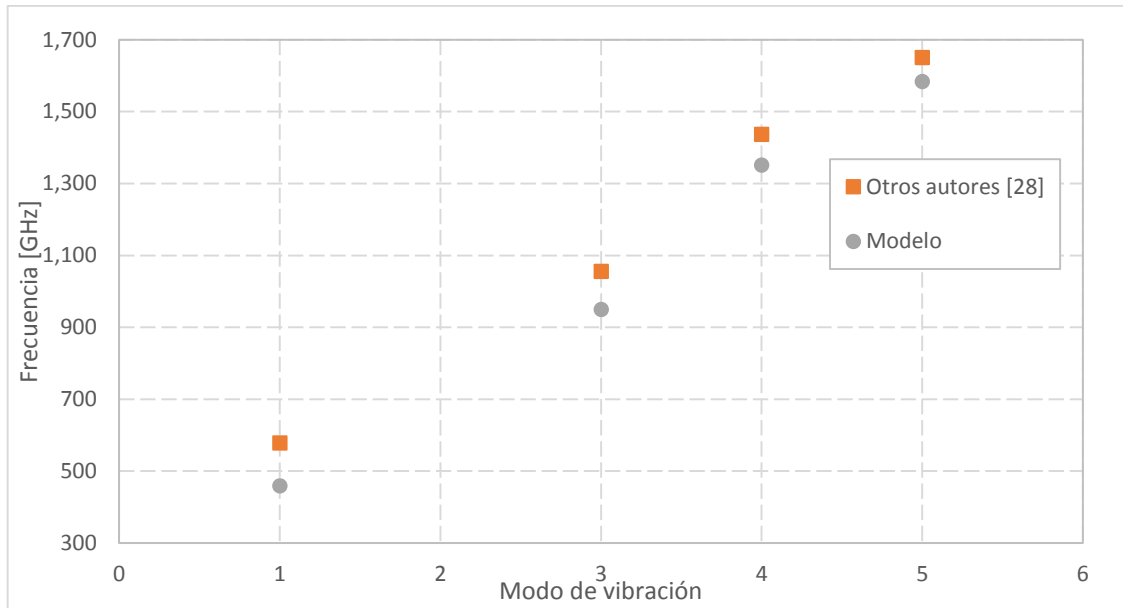
## 5.2 Cálculo de vibraciones y modos propios

Se procede a realizar un análisis dinámico únicamente de mono capa de Grafeno. Se presenta un cálculo de sus frecuencias de vibración y modos propios de las mismas.

### 5.2.1 Grafeno

La primera simulación de análisis dinámico sobre Grafeno se realiza para geometría y condiciones de contorno iguales a otros autores con el fin de comparar resultados.

Para ello, se genera una lámina de grafeno de ancho 3.233 nm y alto 3.183 nm. Condiciones de contorno de empotramiento son aplicadas en todos los nodos de los cuatro extremos laterales de la lámina.



Gráfica 3. Frecuencia vs Modo de vibración. Grafeno

Los autores del estudio con el que se compara no presentaron ni resultado, ni imagen del segundo modo propio.

A continuación, se recoge el error obtenido entre el modelo implementado y el estudio que se emplea para compararlo [28]. Para ello se hace uso de la siguiente expresión que proporciona el error en tanto por ciento.

$$Error (\%) = \frac{Valor Frec Estudio - Valor Frec Modelo}{Valor Frec Estudio} * 100 \quad (15)$$

En la siguiente tabla se recoge el valor de dichos errores.

Modo	Estudio	Modelo	Error (%)
1	579	459	20.73%
3	1056	950	10.04%
4	1437	1352	5.92%
5	1651	1584	4.06%

Tabla 11. Resultados Frecuencia Grafeno.

Finalmente, se ofrecen las deformadas de los modos propios, la Figura 39 corresponde con las deformadas del modelo implementado y la Figura 40 recoge las deformadas obtenidas por el estudio con el que se está comparando.



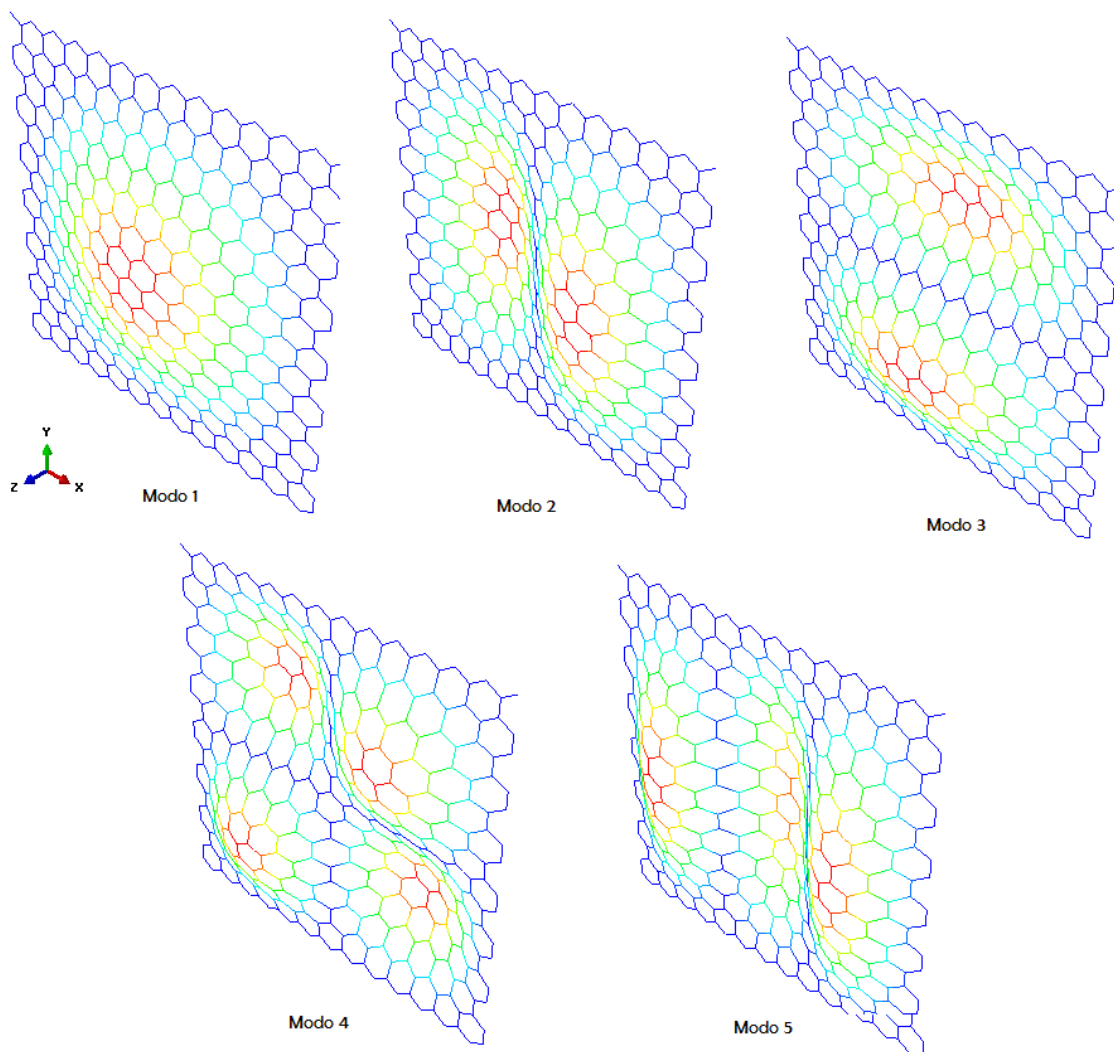


Figura 39. Modos Propios Grafeno. Modelo.

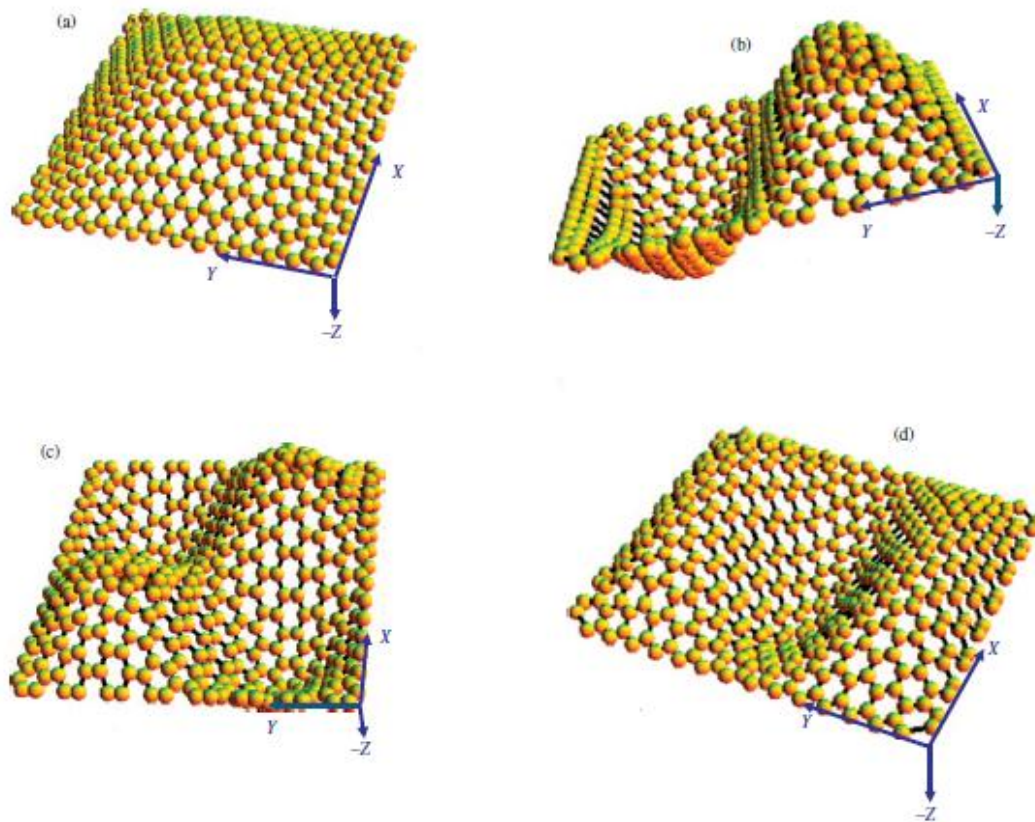


Figura 40. Modos de vibración Grafeno. Estudio [28].

Teniendo en cuenta los ejes de coordenadas adoptados por el trabajo [28] se comprueba como las deformadas son exactamente las mismas que las obtenidas mediante el modelo numérico.



## Capítulo 6

### Resultados

## 6. Resultados

### 6.1 Grafeno

Se procede a estudiar el efecto de distintas condiciones de contorno sobre una mono capa de Grafeno de distintas dimensiones, manteniendo siempre una relación de aspecto de la unidad. Son estudiados cinco tamaños diferentes: 1x1, 2x2, 3x3, 5x5, 7x7 [nm<sup>2</sup>]

Las condiciones de contorno analizadas en esta sección son las siguientes:

- Configuración 1

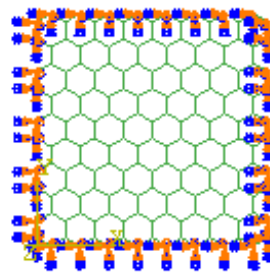


Figura 41. Configuración 1.

- Configuración 2

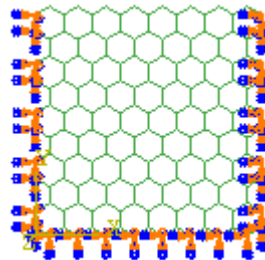


Figura 42. Configuración 2.

- Configuración 3

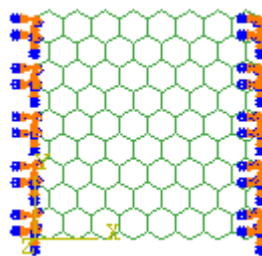


Figura 43. Configuración 3.

#### ■ Configuración 4

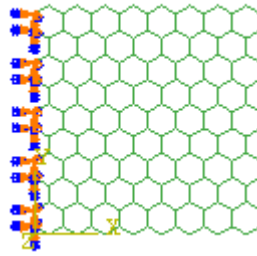
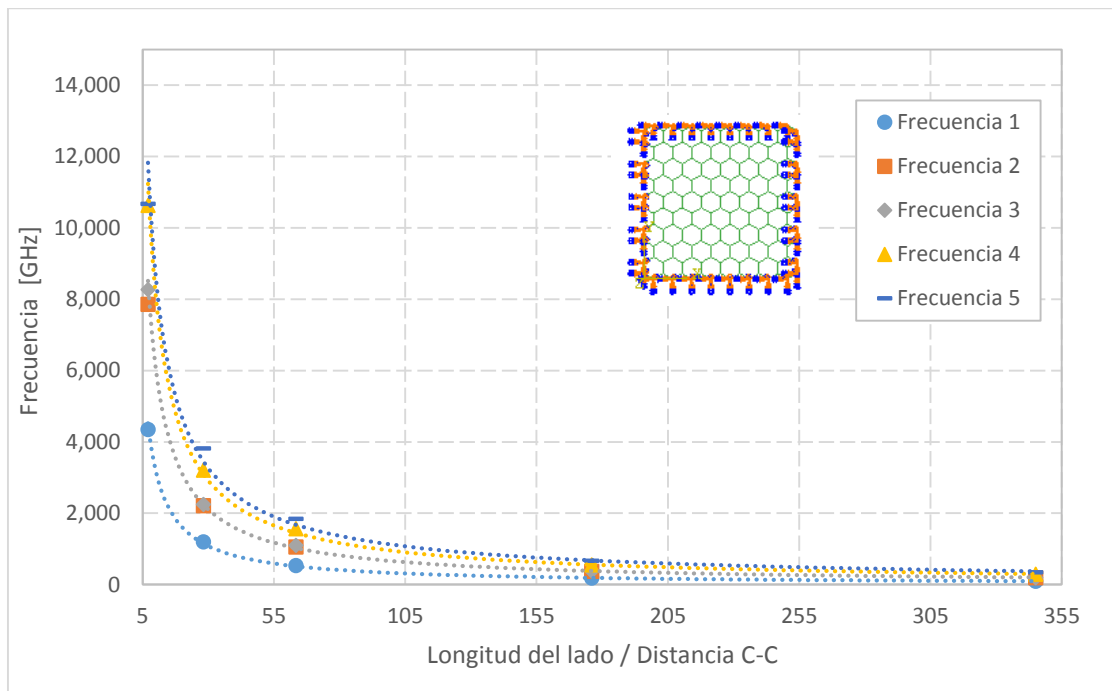


Figura 44. Configuración 4.

A continuación, se grafican las primeras cinco frecuencias propias frente a la variable adimensional resultado de dividir la longitud del lado de la lámina de grafeno entre la distancia entre carbonos enlazados, que equivale a 0.142 nm.



Gráfica 4. Frecuencia-Configuración 1 Grafeno.

De las respectivas curvas representadas en la figura anterior, se obtienen las expresiones correspondientes a una regresión potencial, así como el parámetro  $R^2$  para cada una de ellas:

$$f_1 = 31064 \left( \frac{L}{a_{cc}} \right)^{-0.988} \quad R^2 = 0.9994 \quad (16)$$

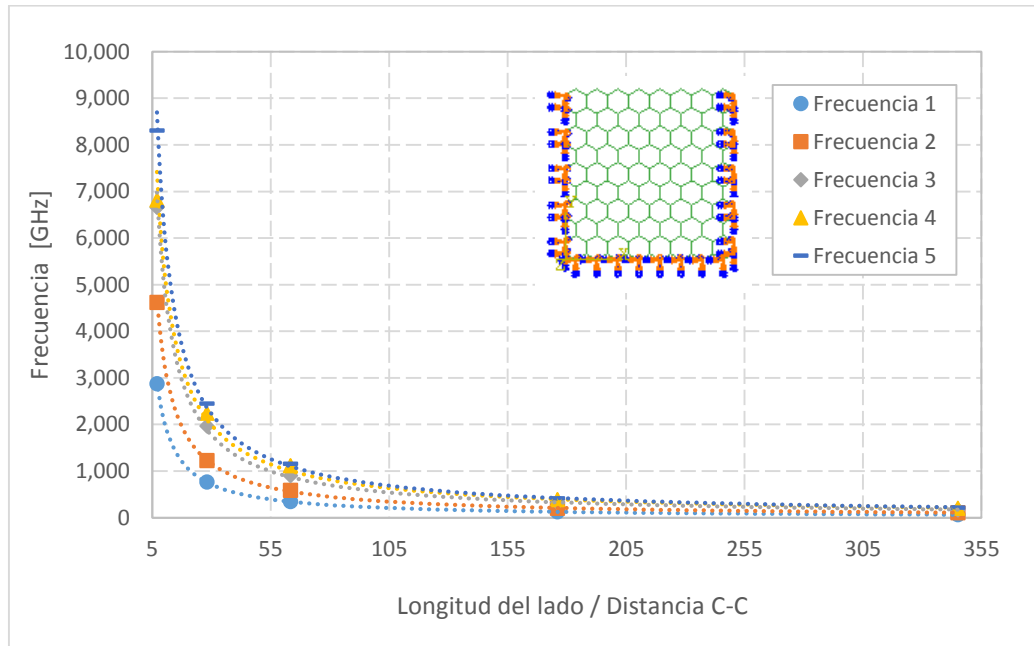
$$f_2 = 52156 \left( \frac{L}{a_{cc}} \right)^{-0.958} \quad R^2 = 0.9994 \quad (17)$$

$$f_3 = 55892 \left( \frac{L}{a_{cc}} \right)^{-0.964} \quad R^2 = 0.9992 \quad (18)$$

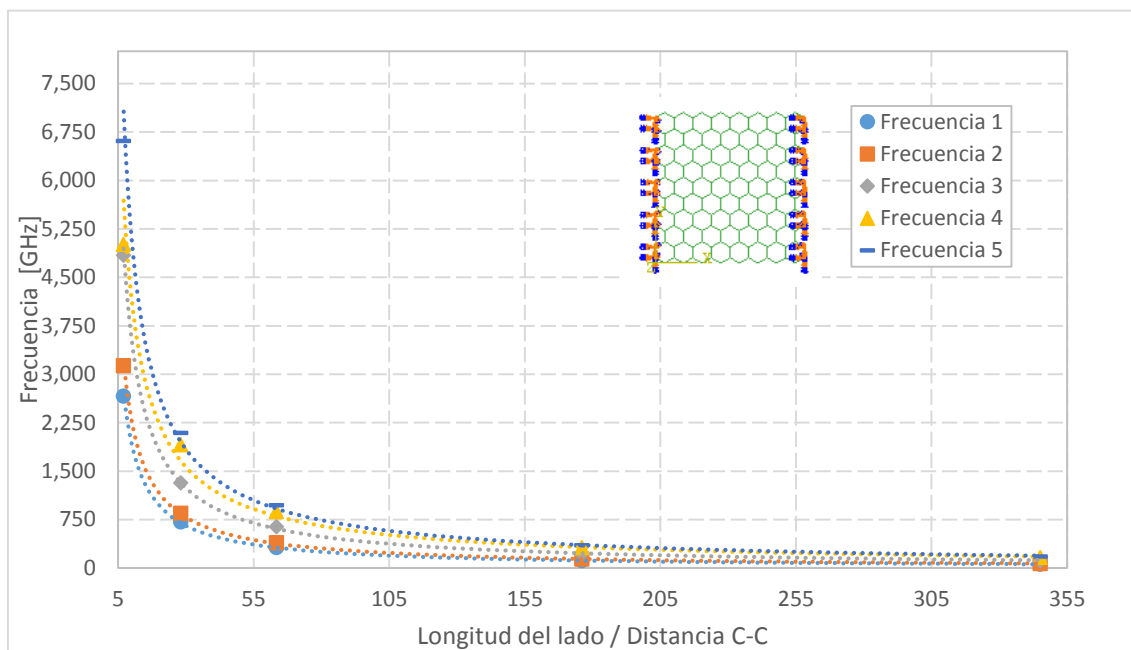
$$f_4 = 69257 \left( \frac{L}{a_{cc}} \right)^{-0.932} \quad R^2 = 0.9984 \quad (19)$$

$$f_5 = 66947 \left( \frac{L}{a_{cc}} \right)^{-0.833} \quad R^2 = 0.9953 \quad (20)$$

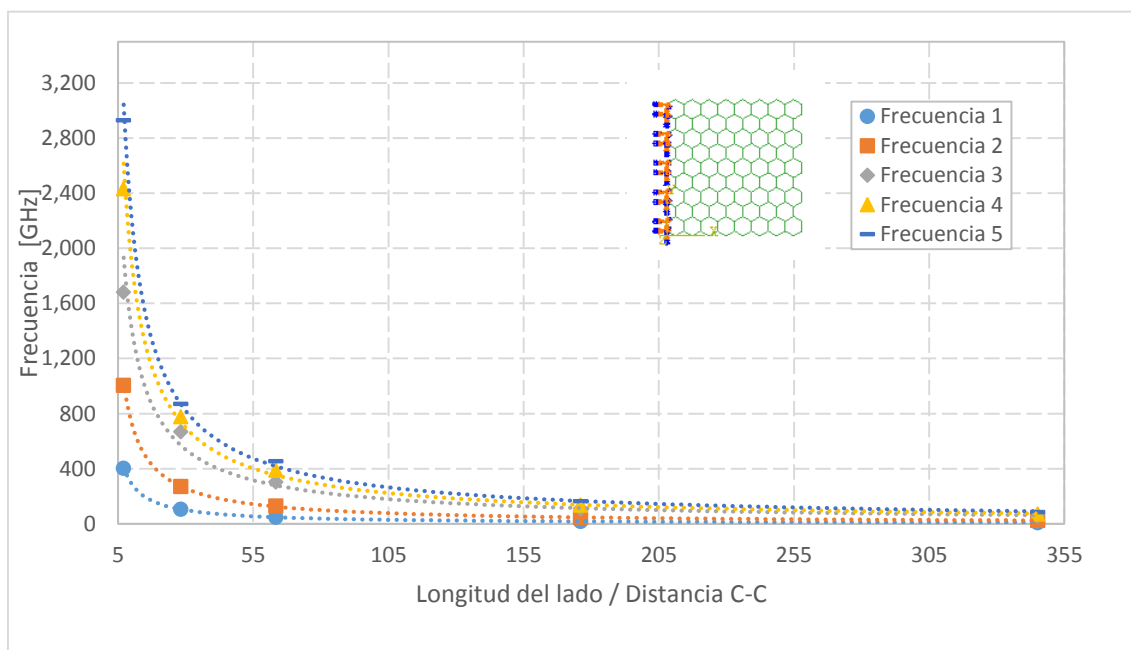
Se representan los resultados obtenidos para el resto de configuraciones, donde nuevamente se muestran los valores de las cinco primeras frecuencias propias de vibración, frente a la variable adimensional definida anteriormente:



Gráfica 5. Frecuencia-Configuración 2 Grafeno.



Gráfica 6. Frecuencia-Configuración 3 Grafeno.



Gráfica 7. Frecuencia-Configuración 4 Grafeno.

Las ecuaciones correspondientes a las regresiones potenciales de las curvas presentadas en las gráficas correspondientes a las configuraciones 2, 3 y 4, se encuentran recogidas en el Anexo 4 del documento.

Analizando los resultados de todas las configuraciones, se aprecia como los mayores valores de frecuencia se dan para aquellas configuraciones con mayor número de coacciones. Por otro lado, se observa como el valor de la frecuencia disminuye al aumentar las dimensiones de la mono capa de Grafeno.

Se puede observar que todos los resultados obtenidos ajustan a curvas potenciales con un elevado coeficiente de determinación. En forma genérica, una curva potencial queda definida de la siguiente forma:

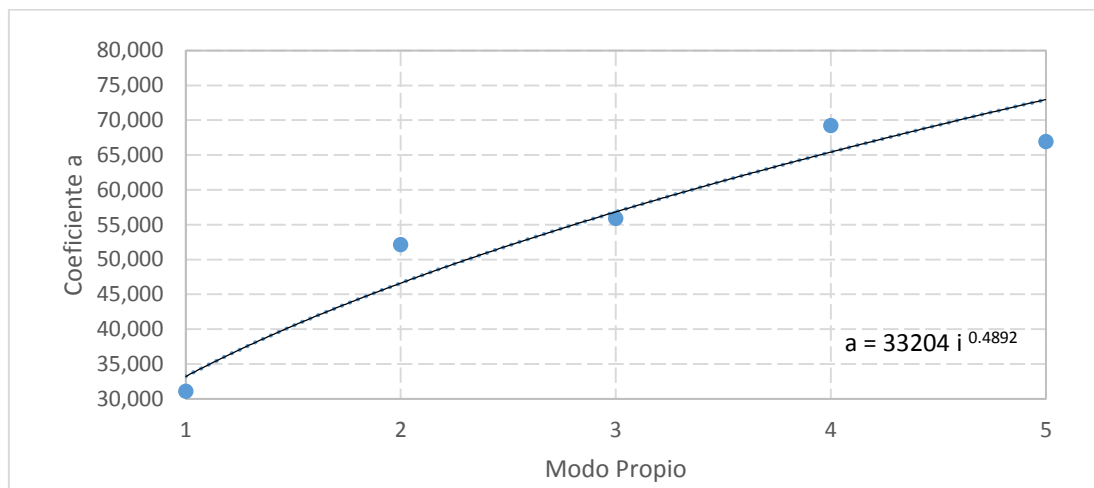
$$f_i = a_i (D)^{-b_i} \quad (21)$$

En la siguiente tabla queda recogido el valor de los coeficientes  $a_i$  y  $b_i$  para la configuración 1, siendo  $i$  el número de modo propio correspondiente.

$a(i)$	$b(i)$	$i$
31064	-0.988	1
52156	-0.958	2
55892	-0.964	3
69257	-0.932	4
66947	-0.833	5

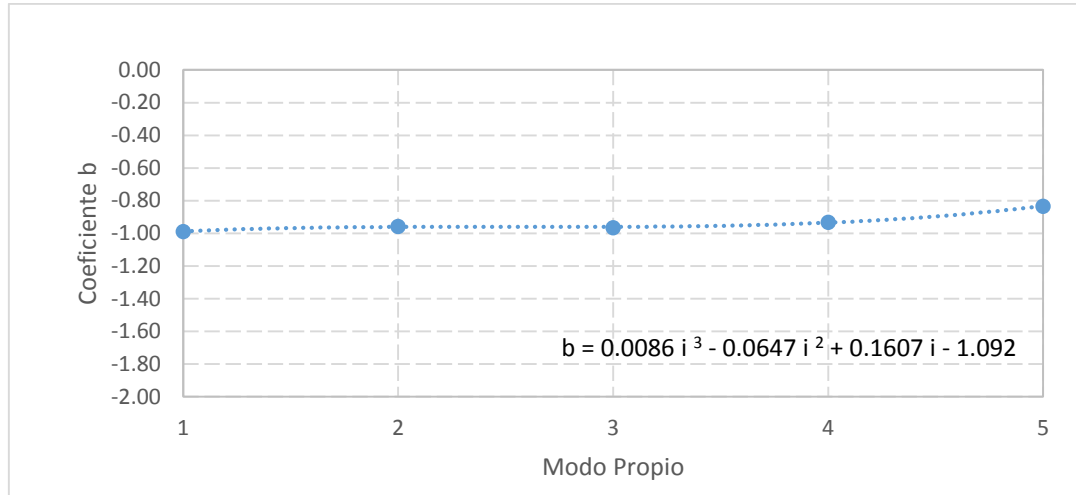
Tabla 12. Coeficientes regresión potencial Configuración 1.

Representando gráficamente estos valores. Se obtienen unas expresiones que proporcionan el valor de los coeficientes  $a_i$  y  $b_i$  en función del modo propio,  $i$ .



Gráfica 8. Coeficiente a.





Gráfica 9. Coeficiente b.

Finalmente, se reescribe la ecuación (21) presentada anteriormente mediante la sustitución en  $a_i$  y  $b_i$  de la expresión que ahora obtenemos y que nos relaciona el valor de los mismos en función del modo propio  $i$  en el que nos encontremos:

$$f_i = (33204 i^{0.4892}) * \left( \frac{L}{a_{cc}} \right)^{(0.0086i^3 - 0.0647i^2 + 0.1607i - 1.092)} \quad (22)$$

Siguiendo el proceso explicado anteriormente, se procede a obtener las ecuaciones que permiten obtener el valor de la frecuencia en función del modo propio deseado para el resto de configuraciones.

Para las siguientes configuraciones solo se presenta la tabla de valores para  $a_i$  y  $b_i$  junto con la expresión. En el apartado de Anexos queda recogida la información de las regresiones de los coeficientes, concretamente en el Anexo 4.

#### ▪ Configuración 2

$a(i)$	$b(i)$	$i$
19813	-0.978	1
31126	-0.967	2
44326	-0.947	3
43830	-0.91	4
54490	-0.94	5

Tabla 13. Coeficientes regresión potencial Configuración 2.

Como resultado de las regresiones aplicadas a las curvas obtenidas, se presenta como resultado la expresión:

$$f_i = (20279 i^{0.6154}) * \left( \frac{L}{a_{cc}} \right)^{(-0.0063i^3 + 0.0524i^2 - 0.1083i - 0.9144)} \quad (23)$$

▪ Configuración 3

$a(i)$	$b(i)$	$i$
18416	-0.98	1
21312	-0.97	2
31880	-0.954	3
32343	-0.89	4
43253	-0.928	5

Tabla 14. Coeficientes regresión potencial Configuración 3.

Como resultado de las regresiones aplicadas a las curvas obtenidas, se presenta como resultado la expresión:

$$f_i = (17107 i^{0.5181}) * \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{(-0.009i^3 + 0.0776i^2 - 0.1734i - 0.8724)} \quad (24)$$

▪ Configuración 4

$a(i)$	$b(i)$	$i$
2793	-0.983	1
6694.8	-0.961	2
10787	-0.881	3
15510	-0.881	4
17792	-0.905	5

Tabla 15. Coeficientes regresión potencial Configuración 4.

Como resultado de las regresiones aplicadas a las curvas obtenidas, se presenta como resultado la expresión:

$$f_i = (2881.1 i^{1.1773}) * \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{(-0.0068i^3 + 0.0492i^2 - 0.064i - 0.9642)} \quad (25)$$

Como puede observarse, se ha procedido a realizar una regresión potencial para el coeficiente  $a_i$  y una regresión polinómica de grado tres para el coeficiente  $b_i$ .

Para el caso del coeficiente  $a$  se presentaba la opción de realizar regresión potencial o regresión polinómica de grado tres, ambas con un coeficiente de determinación superior a 0.9. Sin embargo, debido a que la regresión potencial da como resultado una expresión más simple, se opta por emplear la regresión potencial, ya que ésta ofrece una forma más compacta.

A continuación, se presentan los primeros cinco modos propios de cada configuración.

■ Configuración 1:

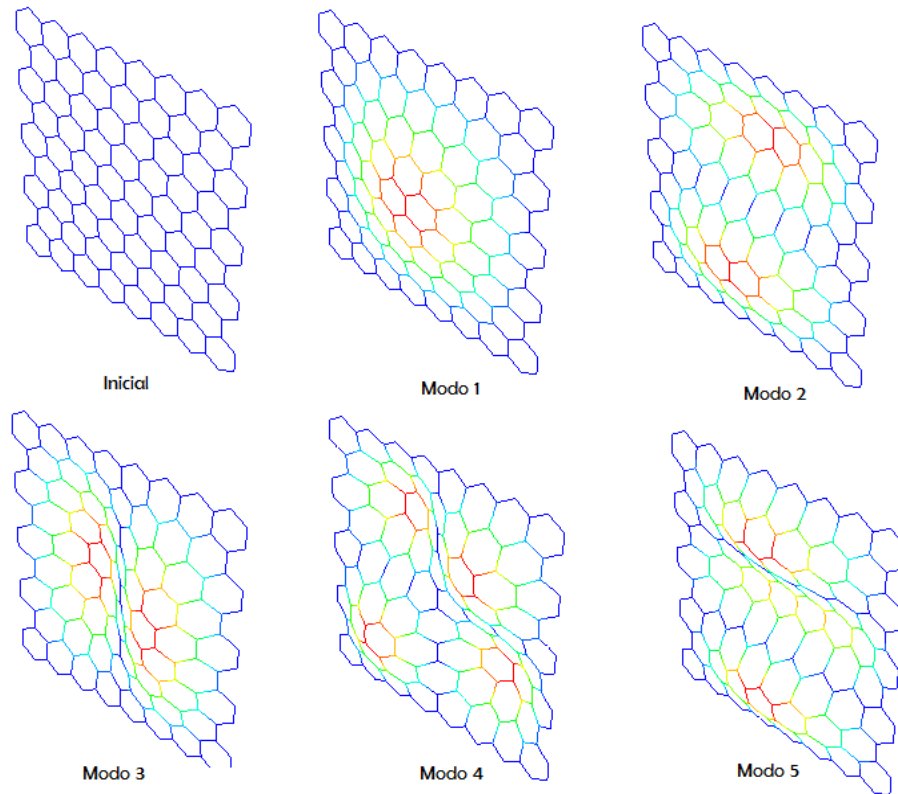


Figura 45. Modos Propios Grafeno Configuración 1

■ Configuración 2

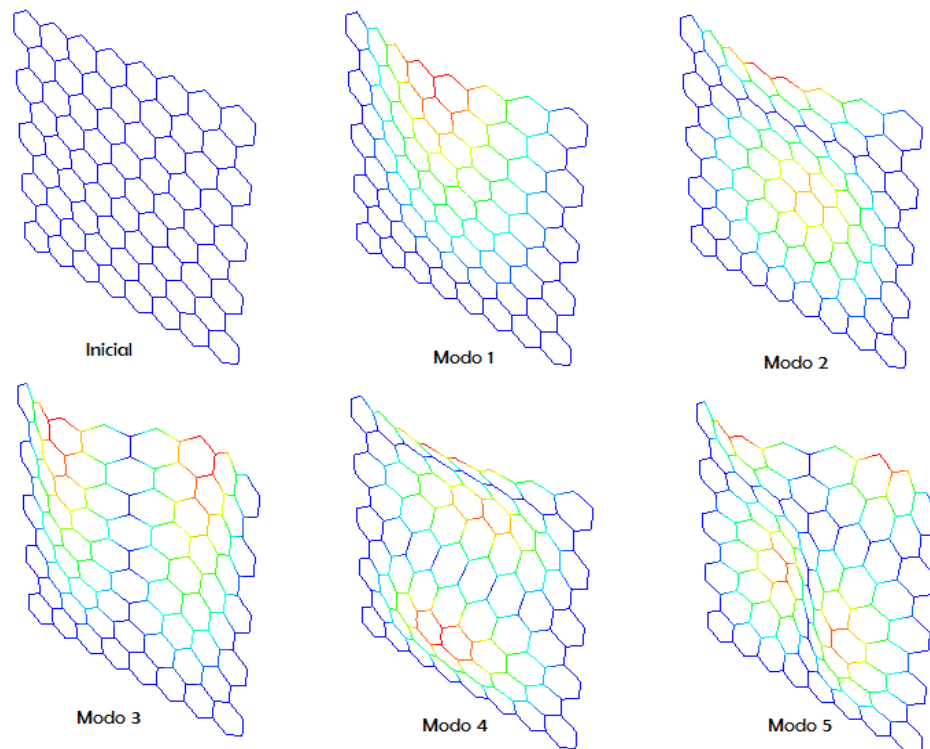


Figura 46. Modos Propios Grafeno Configuración 2

■ Configuración 3.

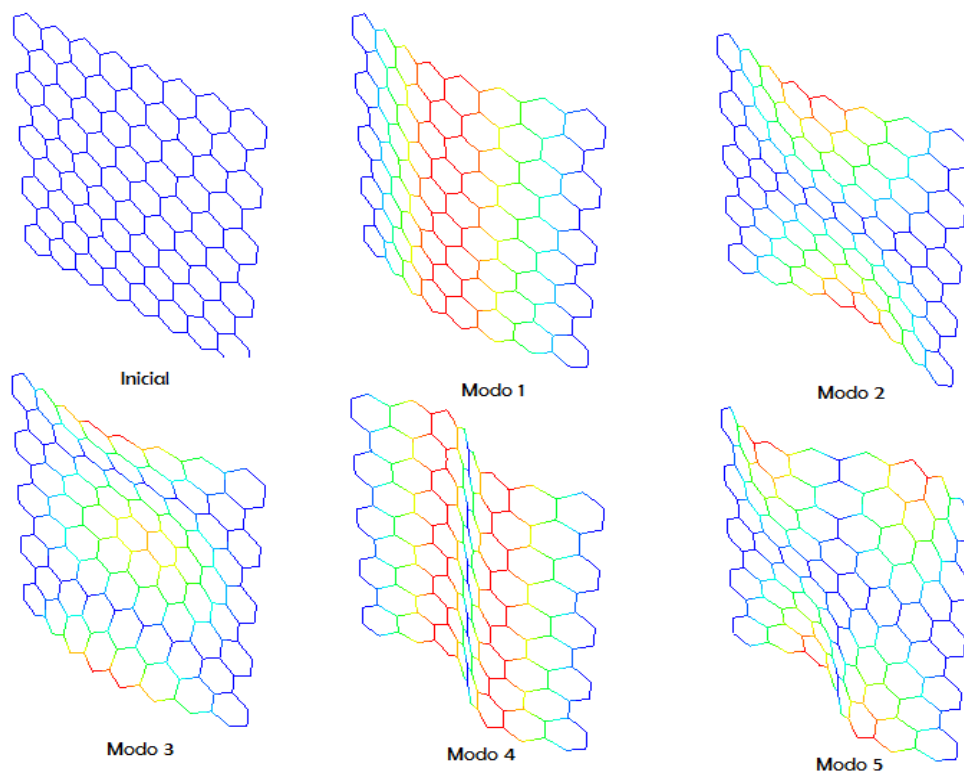


Figura 47. Modos Propios Grafeno Configuración 3

■ Configuración 4.

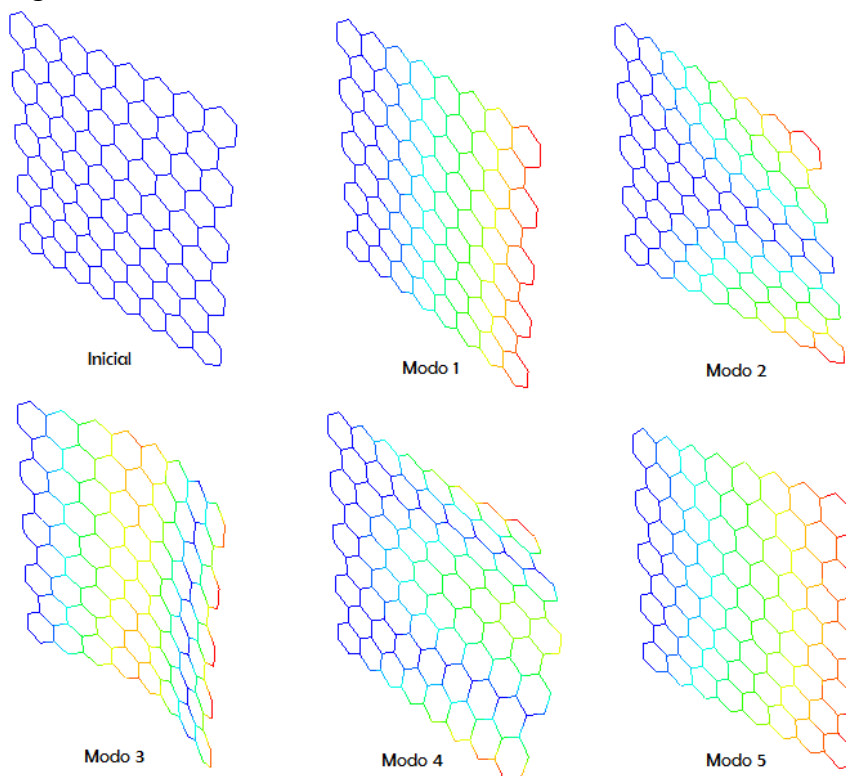


Figura 48. Modos Propios Grafeno Configuración 4

## 6.2 Nanotubos de Carbono

Se estudian tanto Nanotubos de Carbono de tipo ZigZag, en los que  $m$  es igual a cero, como nanotubos de tipo Armchair, en los que ambos Índices de Hamada tienen el mismo valor. Además, dos configuraciones son empleadas: Cantilever y Biempotrado.

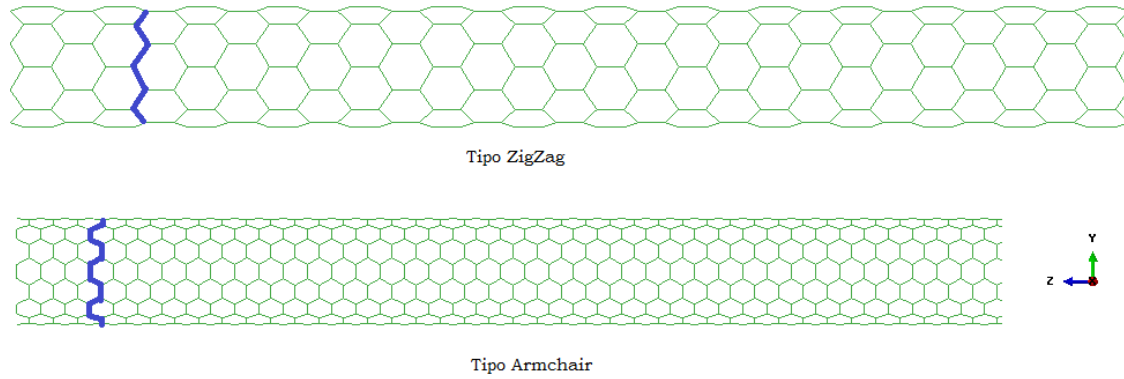
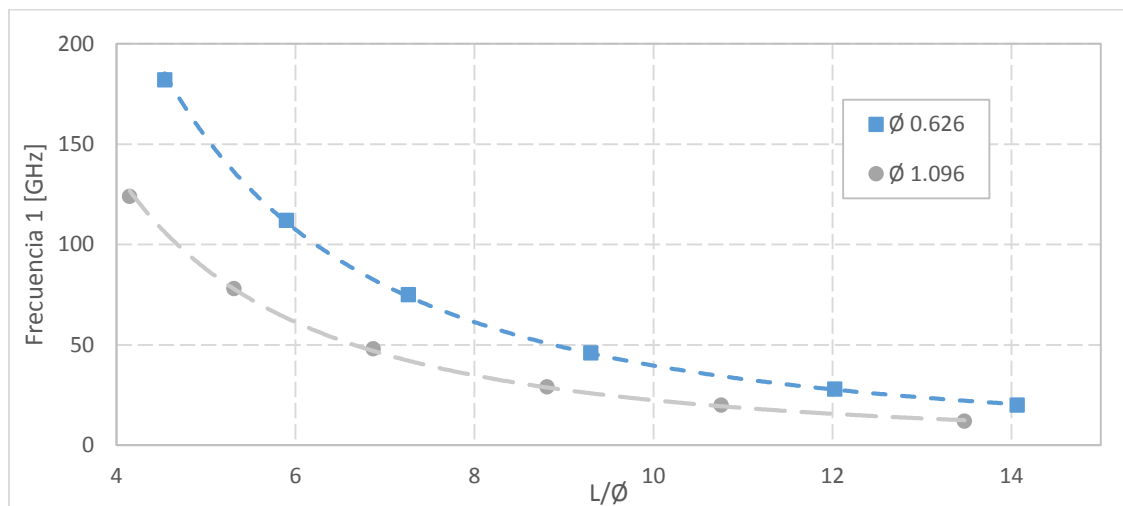


Figura 49. ZigZag vs. Armchair

En todos los casos se analizarán dos diámetros diferentes: 0.626 nm. y 1.096 nm. Obteniéndose la frecuencia fundamental de vibración, frente a la variable adimensional definida como la relación entre la longitud del nanotubo y su diámetro.

### ▪ Cantilever- ZigZag.



Gráfica 10. Frecuencia vs Relación de aspecto para CNT Cantilever – ZigZag.

Al igual que en el caso anterior, se obtienen expresiones que permiten calcular la frecuencia natural para los diámetros analizados, en función de su longitud:

- Diámetro 0.626 nm:

$$f_1 = 3532.5 \left( \frac{L}{\varnothing} \right)^{-1.949} \quad R^2 = 0.9997 \quad (26)$$

- Diámetro 1.096 nm:

$$f_1 = 2038.4 \left( \frac{L}{\varnothing} \right)^{-1.968} \quad R^2 = 0.9991 \quad (27)$$

- Bridge – ZigZag.

En este caso, las dos ecuaciones que permiten obtener el valor de la primera frecuencia natural para el caso biempotrado vienen dadas por:

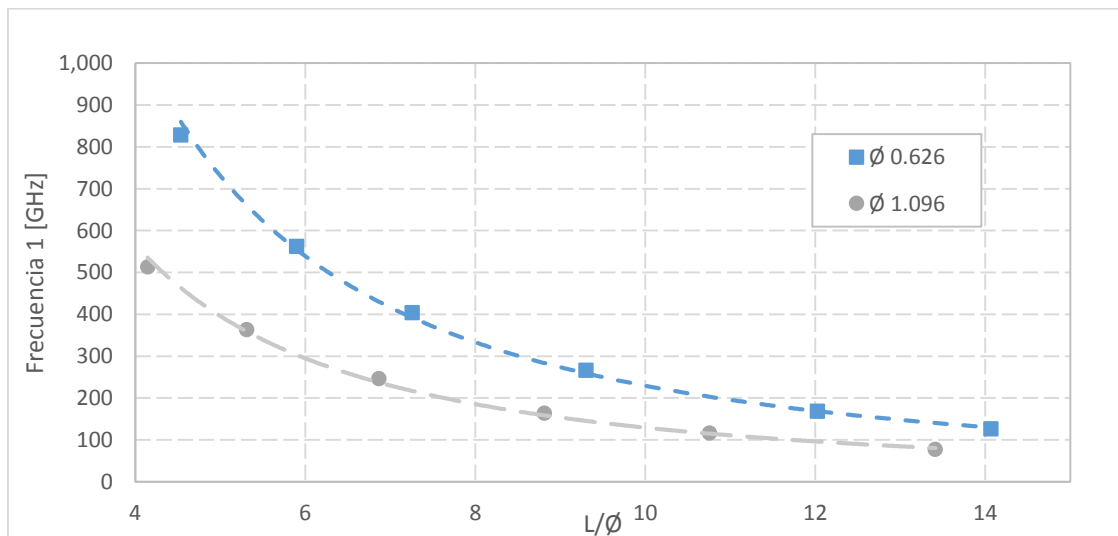
- Diámetro 0.626

$$f_1 = 10763 \left( \frac{L}{\varnothing} \right)^{-1.671} \quad R^2 = 0.9984 \quad (28)$$

- Diámetro 1.096

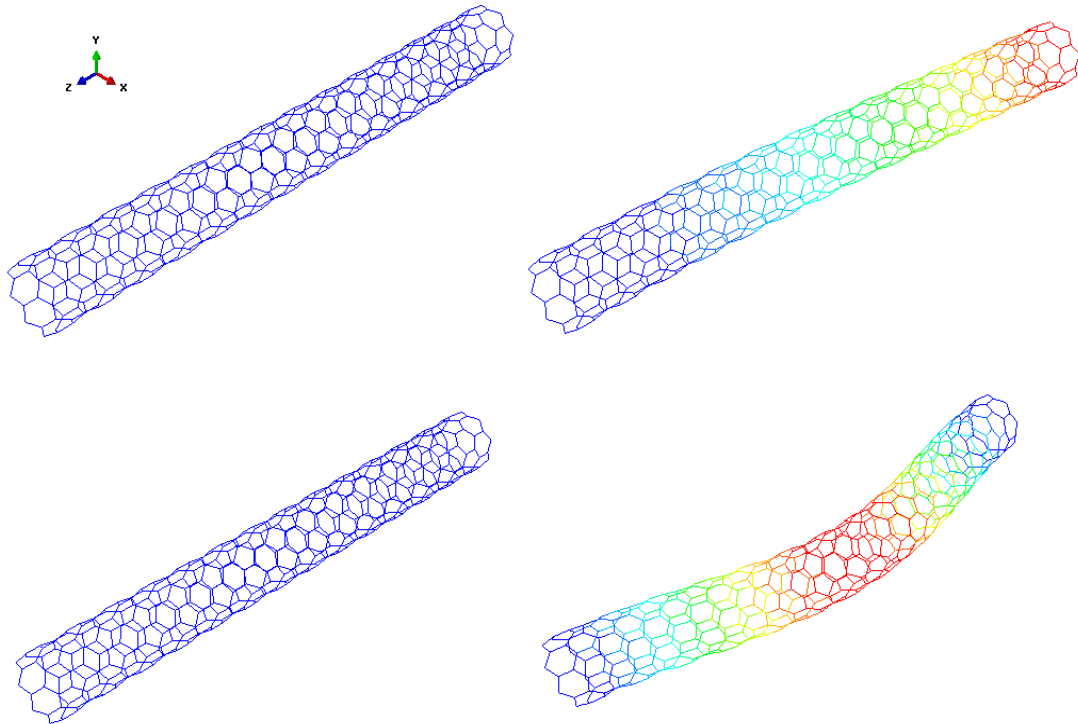
$$f_1 = 5311.1 \left( \frac{L}{\varnothing} \right)^{-1.613} \quad R^2 = 0.9974 \quad (29)$$

En la siguiente gráfica se representan los resultados obtenidos para diferentes longitudes de los Nanotubos de Carbono, así como las regresiones potenciales anteriores.



Gráfica 11. Frecuencia vs Relación de aspecto para CNT Bridge – ZigZag.

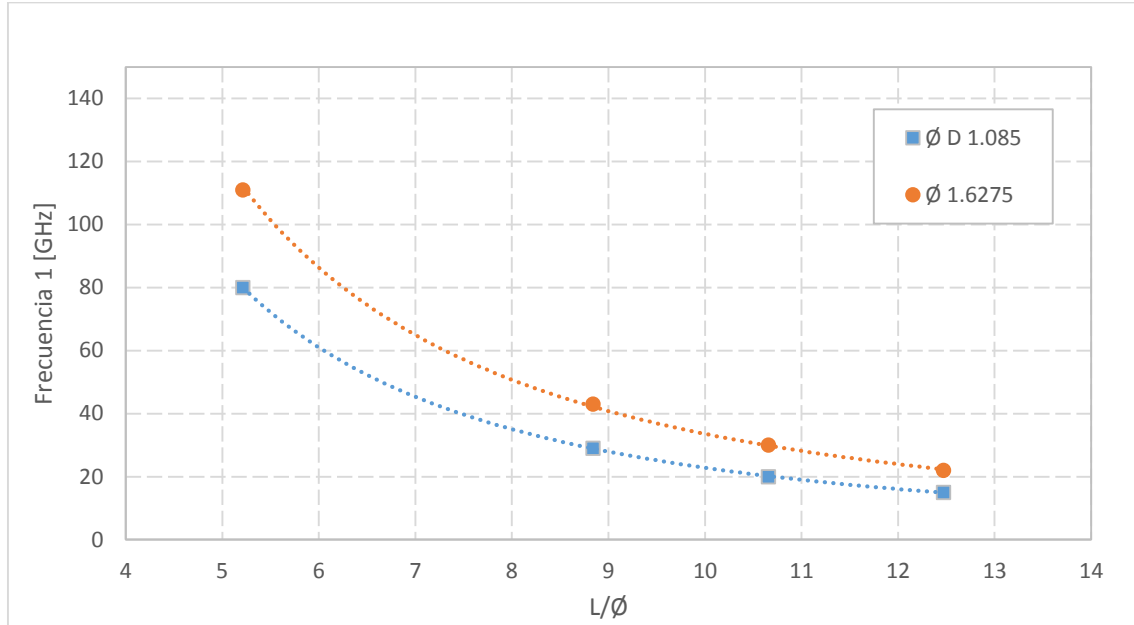
Las deformadas correspondientes al primer modo de vibración de las dos configuraciones de nanotubo ZigZag analizadas, aparecen representadas en la figura 50. La primera deformada corresponde a Cantilever y la segunda a Bridge.



*Figura 50. Primer modo propio para Cantilever y Bridge ZigZag.*

Para la configuración Armchair los diámetros que se estudian corresponden con 1.085 nm y 1.627 nm. Para ellos, igual que en el caso anterior, se obtiene la frecuencia fundamental de vibración, frente a la variable adimensional definida como la relación entre la longitud del nanotubo y su diámetro.

▪ Cantilever - Armchair.



Gráfica 12. Frecuencia vs Relación de aspecto para CNT Cantilever – Armchair.

Se obtienen expresiones que permiten calcular la frecuencia natural para los diámetros analizados, en función de su longitud:

Diámetro 1.085

$$f_1 = 2370.4 \left( \frac{L}{\phi} \right)^{-1.849} \quad R^2 = 0.9995 \quad (30)$$

Diámetro 1.6275

$$f_1 = 2370 \left( \frac{L}{\phi} \right)^{-1.849} \quad R^2 = 0.9995 \quad (31)$$

▪ Bridge – Armchair.

En este caso, las dos ecuaciones que permiten obtener el valor de la primera frecuencia natural para el caso biempotrado vienen dadas por:

Diámetro 1.085

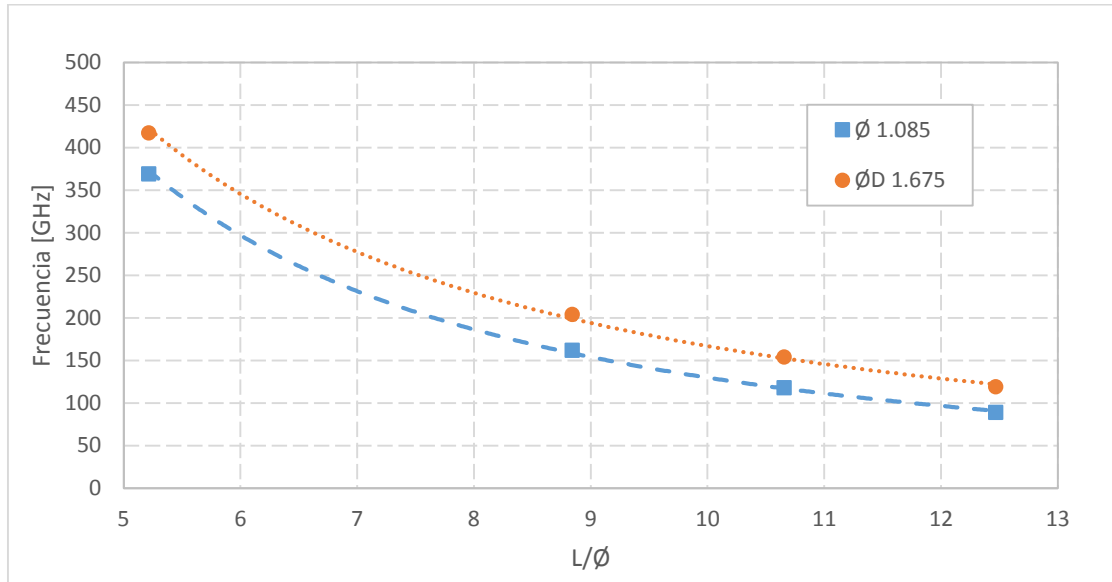
$$f_1 = 5413.9 \left( \frac{L}{\phi} \right)^{-1.62} \quad R^2 = 0.9991 \quad (32)$$



Diámetro 1.6275

$$f_1 = 4437 \left( \frac{L}{\phi} \right)^{-1.62} \quad R^2 = 0.9983 \quad (33)$$

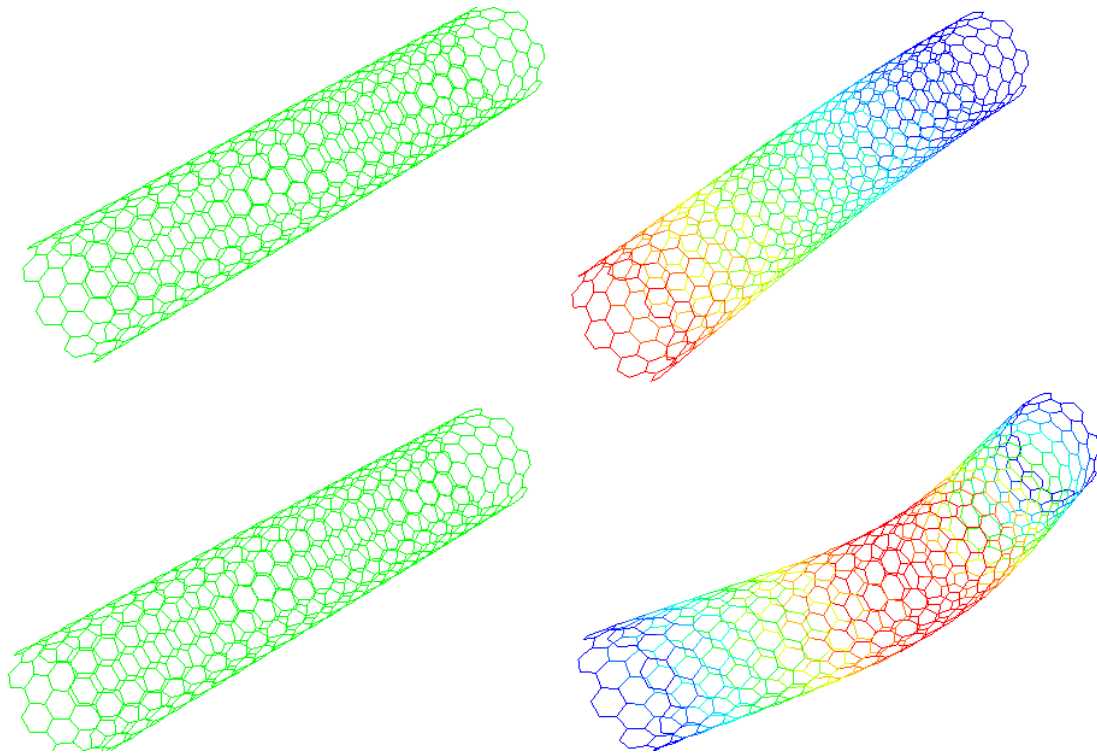
En la siguiente gráfica se representan los resultados obtenidos para diferentes longitudes de los nanotubos, así como las regresiones potenciales anteriores.



Gráfica 13. Frecuencia vs Relación de aspecto para Bridge – Armchair.

Las deformadas correspondientes al primer modo de vibración de las dos configuraciones de Nanotubo de Carbono con configuración Armchair analizados, aparecen representadas en la figura 51.

Del mismo modo que para ZigZag, la primera imagen de la figura 51 corresponde con el caso Cantilever o ménsula y la segunda imagen con el caso biempotrado o Bridge.



*Figura 51. Primer modo propio para Cantilever y Bridge Armchair.*

Se comprueba como todas las curvas ajustan a curvas potenciales con un coeficiente de determinación elevado. El valor de la frecuencia depende de la configuración de los Nanotubos de Carbono. En configuración ZigZag, mayores valores de diámetro se traducen en menores valores de frecuencia sucediendo. Lo contrario ocurre para Armchair, donde valores menores de diámetro dan como resultado menores valores de frecuencia.

### 6.3 Fullerenos

Dado que los parámetros más importantes a la hora de realizar ensayos dinámicos son: Las propiedades del material, las condiciones de contorno y la geometría de la estructura a resolver. Se seleccionan para estudio aquellos Fullerenos cuya geometría es lo más parecida a una esfera, dejando apartados los que tienen geometrías marcadamente elipsoidales u ovaladas.

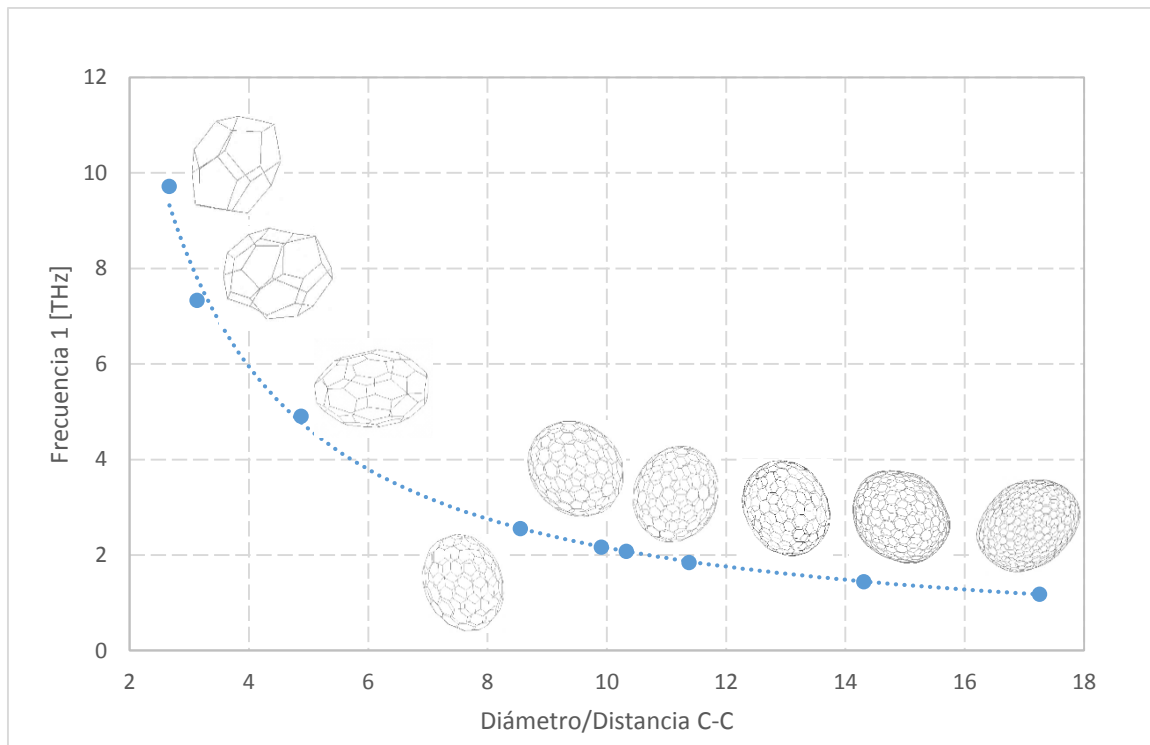
El Fullerenos con menor número de carbonos estudiado es el C 20 y el mayor es el C 720.

El diámetro de los Fullerenos se calcula mediante un promedio de los tres diámetros obtenidos en la generación de la geometría. Consiste en medir la distancia entre los carbonos de los extremos de los tres ejes de coordenadas sobre los que se genera la geometría y realizar una media simple. La distancia entre carbonos corresponde a 0.142 nm.

A continuación, se presentan los resultados obtenidos en las simulaciones para los cinco primeros valores de frecuencia, y sus respectivos modos propios. Se realiza un ajuste potencial y se muestra el valor de  $R^2$  para valorar la calidad del ajuste.

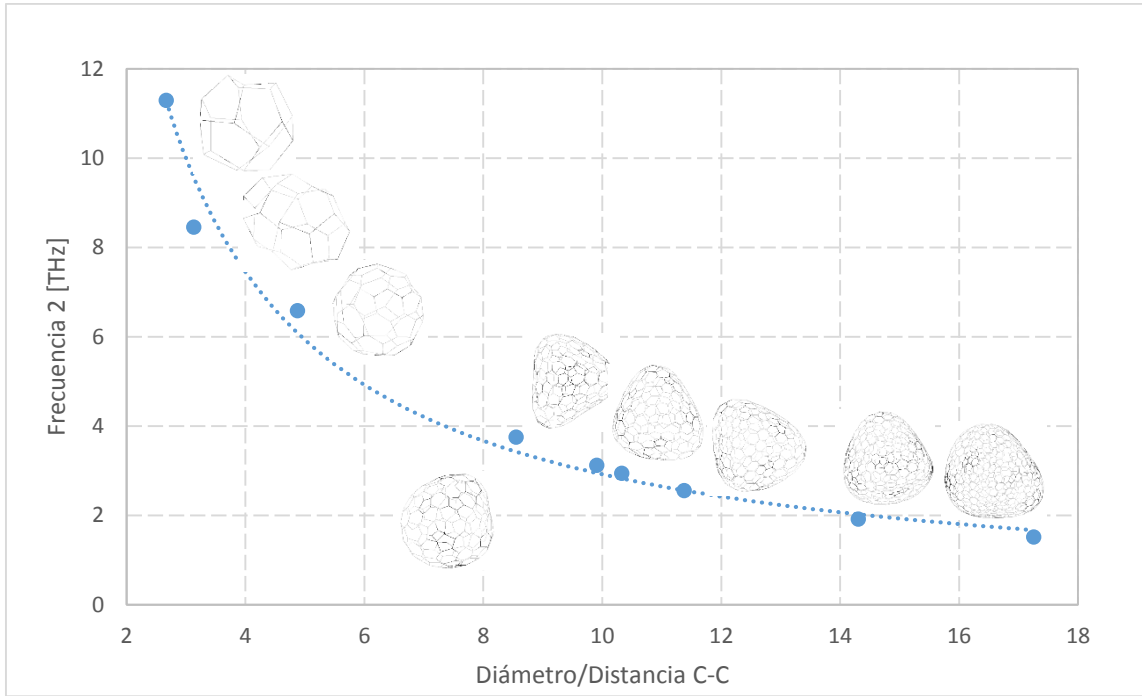
Por lo tanto, en las siguientes gráficas se presenta el valor de cada una de las frecuencias en función de un parámetro adimensional que consiste en dividir el diámetro del Fullerenos entre la distancia mínima entre átomos de carbonos. También se colocan las deformaciones producidas en los distintos Fullerenos.

En el Anexo 5 se encuentran las deformaciones producidas en los Fullerenos pero a mayor tamaño.



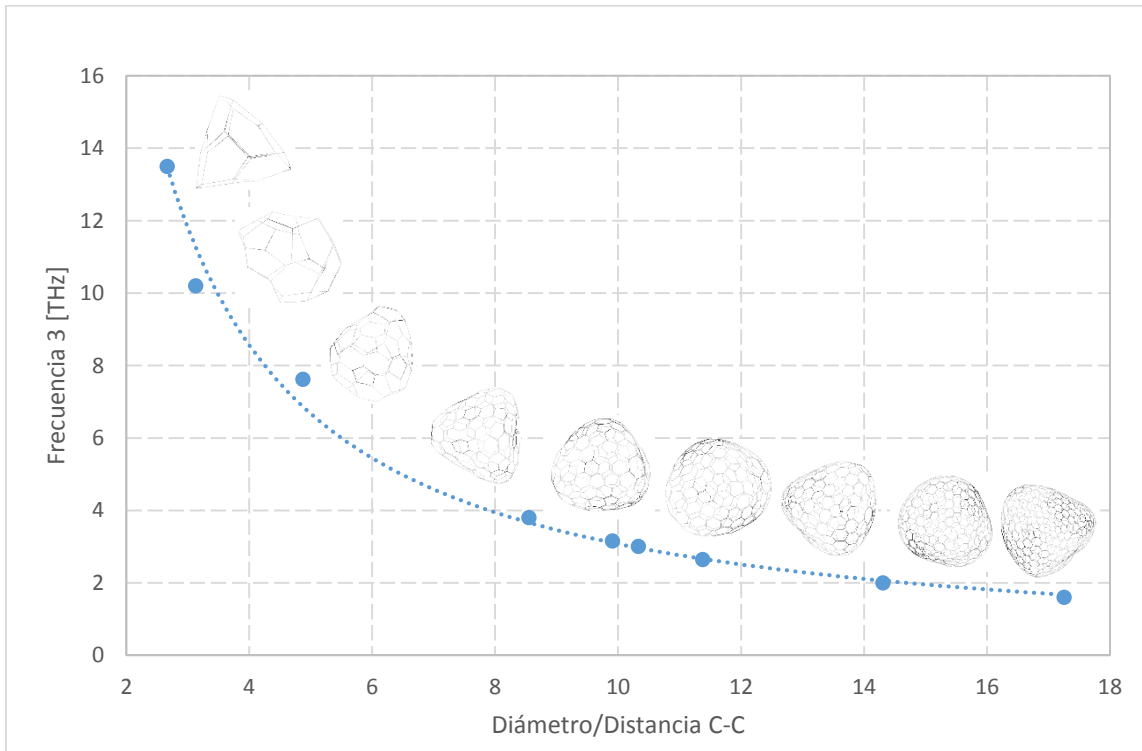
Gráfica 14. Frecuencia 1 vs Diámetro/acc.

$$f_1 = 27.648 \cdot \left( \frac{\varnothing}{a_{cc}} \right)^{-1.109} \quad R^2 = 0.9985 \quad (34)$$



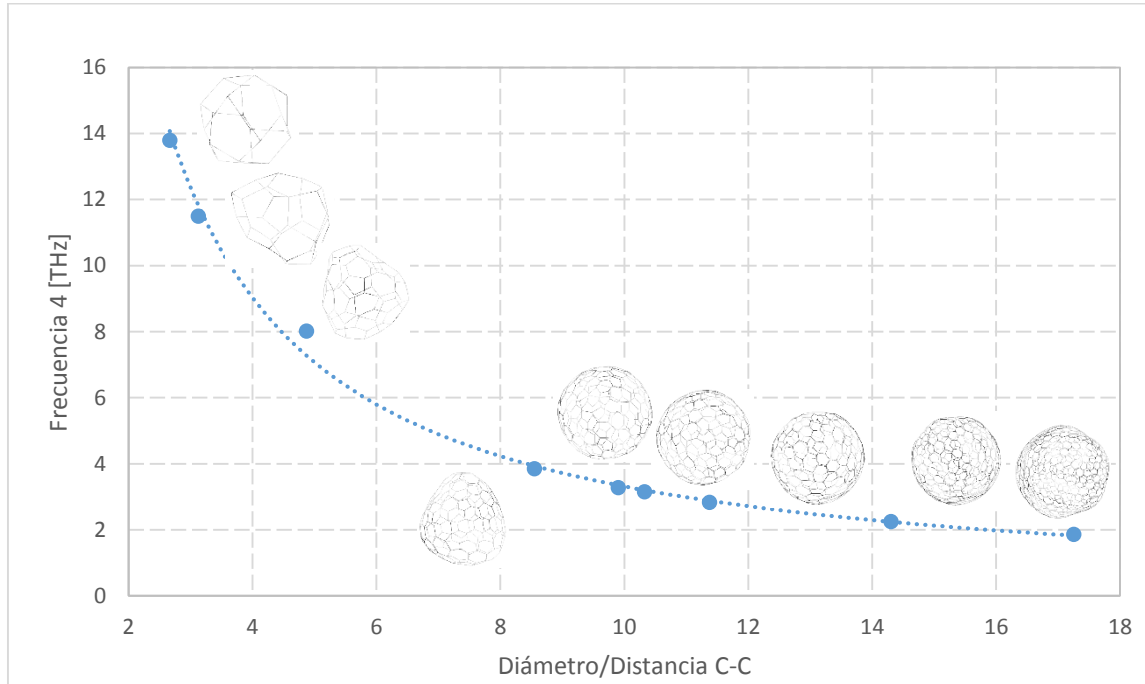
Gráfica 15. Frecuencia 2 vs Diámetro/acc.

$$f_2 = 30.729 \cdot \left( \frac{\varnothing}{a_{cc}} \right)^{-1.022} \quad R^2 = 0.9871 \quad (35)$$



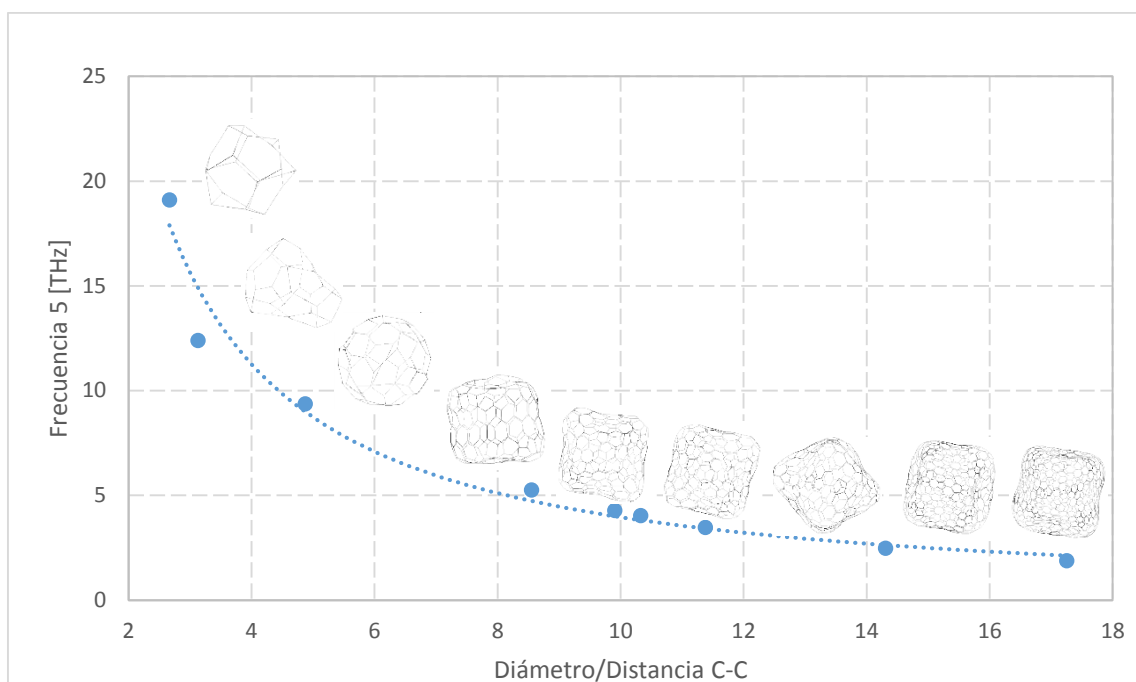
Gráfica 16. Frecuencia 3 vs Diámetro/acc.

$$f_3 = 40.333 \left( \frac{\varnothing}{a_{cc}} \right)^{-1.188} \quad R^2 = 0.9943 \quad (36)$$



Gráfica 17. Frecuencia 4 vs Diámetro/acc.

$$f_4 = 41.146 \left( \frac{\varnothing}{a_{cc}} \right)^{-1.094} \quad R^2 = 0.9971 \quad (37)$$



Gráfica 18. Frecuencia 5 vs Diámetro/acc.

$$f_5 = 54.747 \left( \frac{\varnothing}{a_{cc}} \right)^{-1.141} \quad R^2 = 0.9835 \quad (38)$$

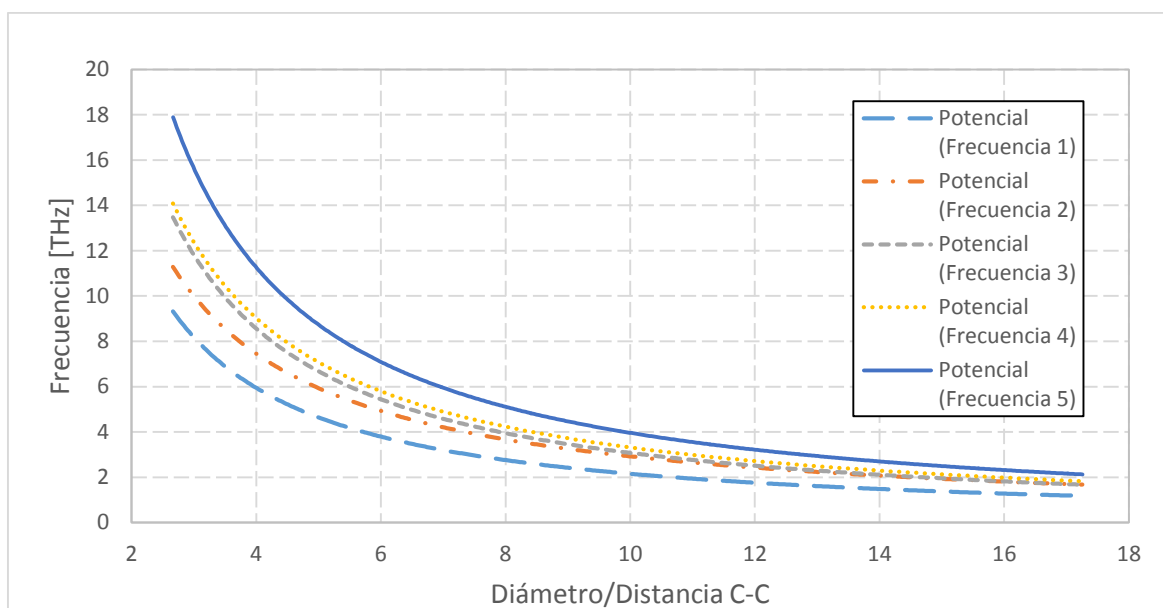
Los resultados representados en las figuras anteriores quedan recogidos en la siguiente tabla:

<b>Modelo</b>	<b>Fullereno Esférico</b>								
<b>Frecuencia [THz]</b>	<b>20</b>	<b>30</b>	<b>60</b>	<b>180</b>	<b>240</b>	<b>260</b>	<b>320</b>	<b>500</b>	<b>720</b>
1	9.72	7.34	4.91	2.56	2.17	2.08	1.85	1.45	1.18
2	11.30	8.46	6.59	3.76	3.13	2.95	2.56	1.92	1.52
3	13.50	10.20	7.62	3.80	3.16	3.01	2.65	2.00	1.61
4	13.80	11.50	8.02	3.86	3.28	3.15	2.83	2.25	1.86
5	19.10	12.40	9.38	5.26	4.28	4.05	3.48	2.49	1.89

Tabla 16. Resultados Frecuencias Modelo.

Se observa como el valor de la frecuencia disminuye al aumentar la relación diámetro entre distancia C-C, es decir, al aumentar el número de carbonos que constituyen el Fullereno. Las curvas obtenidas ajustan perfectamente a curvas potenciales.

A continuación se grafican las frecuencias mediante las funciones de ajuste obtenidas anteriormente, el hecho de que se trate de regresiones potenciales aparece reflejado en la leyenda como “Potencial”.



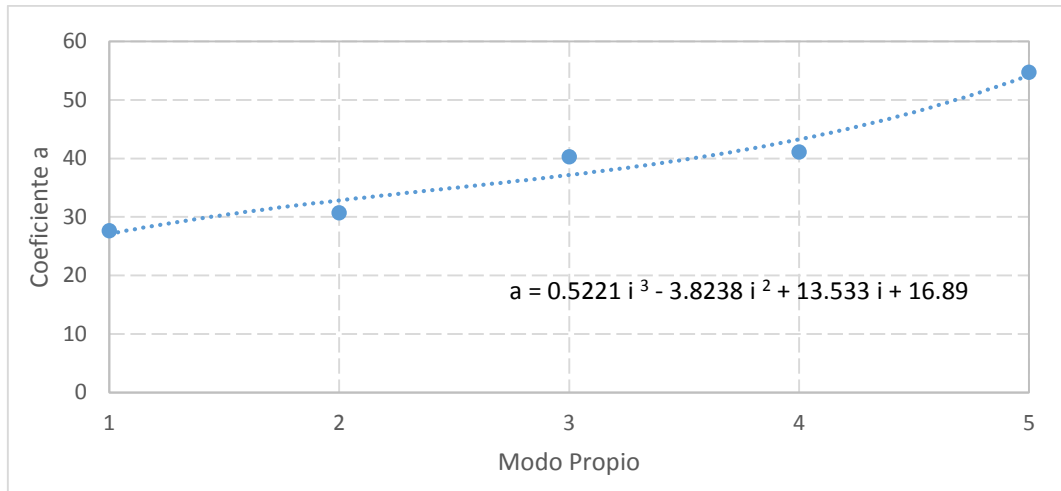
Gráfica 19. Regresiones potenciales para las cinco primeras frecuencias Fullerenos Esféricos.

Se procede a obtener una única ecuación que permita obtener el valor de la frecuencia dependiendo únicamente del parámetro adimensional seleccionado en el estudio y del modo propio deseado.

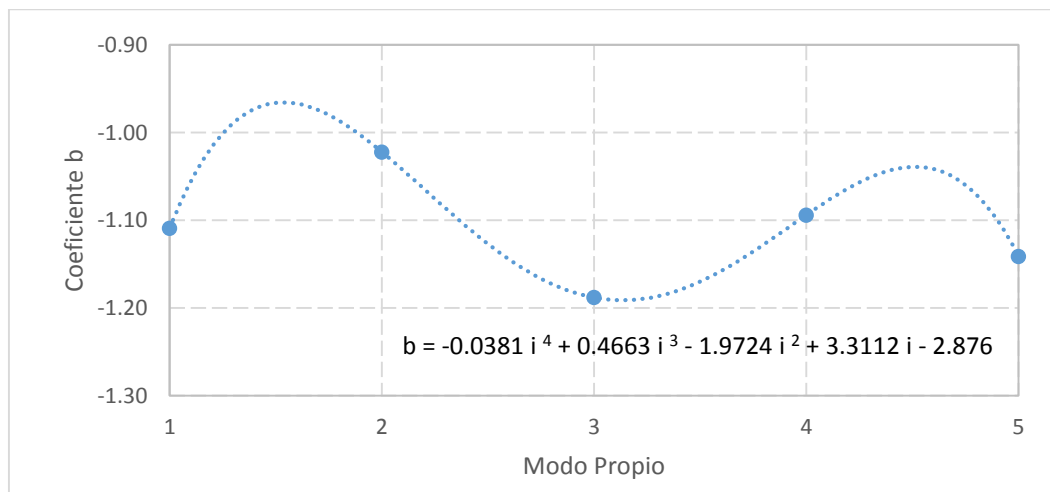
Se ofrece la siguiente tabla con el valor de los coeficientes de las respectivas regresiones potenciales para cada modo propio.

$a(i)$	$b(i)$	$i$
27.648	-1.109	1
30.729	-1.022	2
40.333	-1.188	3
41.146	-1.094	4
54.747	-1.141	5

Tabla 17. Coeficientes regresión potencial.



Gráfica 20. Coeficiente a.



Gráfica 21. Coeficiente b.

$$f_i = (0.5221i^3 - 3.8238i^2 + 13.533i + 16.89) * \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{(-0.0381i^4 + 0.4663i^3 - 1.9724i^2 + 3.3112i - 2.876)} \quad (39)$$

Donde  $i$  es el modo propio del que queremos obtener la frecuencia.

Como se aprecia, se ha realizado una regresión polinómica de orden tres para el coeficiente a y una regresión polinómica de orden cuatro para el coeficiente b.

Los resultados numéricos obtenidos mediante el empleo de la expresión propuesta se encuentran recogidos en la siguiente tabla:

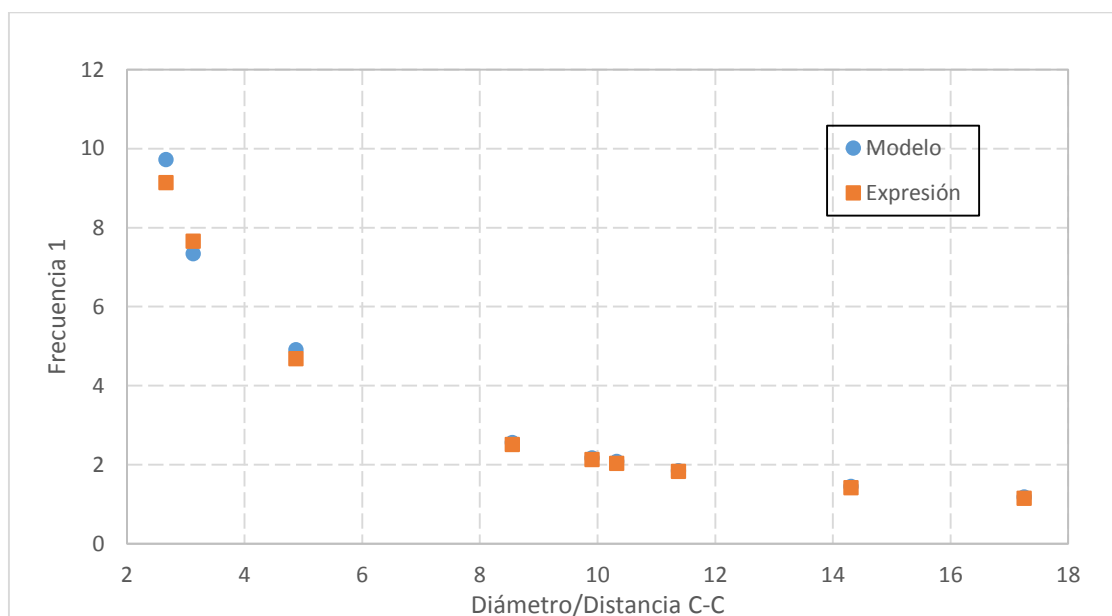


<i>Expresión</i>	<i>Fullerenos Esférico</i>								
<i>Frecuencia [THz]</i>	<b>20</b>	<b>30</b>	<b>60</b>	<b>180</b>	<b>240</b>	<b>260</b>	<b>320</b>	<b>500</b>	<b>720</b>
1	9.14	7.65	4.68	2.51	2.13	2.04	1.83	1.42	1.15
2	11.57	9.57	5.64	2.89	2.43	2.31	2.06	1.57	1.25
3	12.05	10.23	6.50	3.66	3.15	3.02	2.73	2.16	1.79
4	14.71	12.33	7.57	4.08	3.47	3.32	2.98	2.32	1.89
5	17.47	14.52	8.70	4.55	3.84	3.66	3.27	2.51	2.02

Tabla 18. Resultado Frecuencia Expresión.

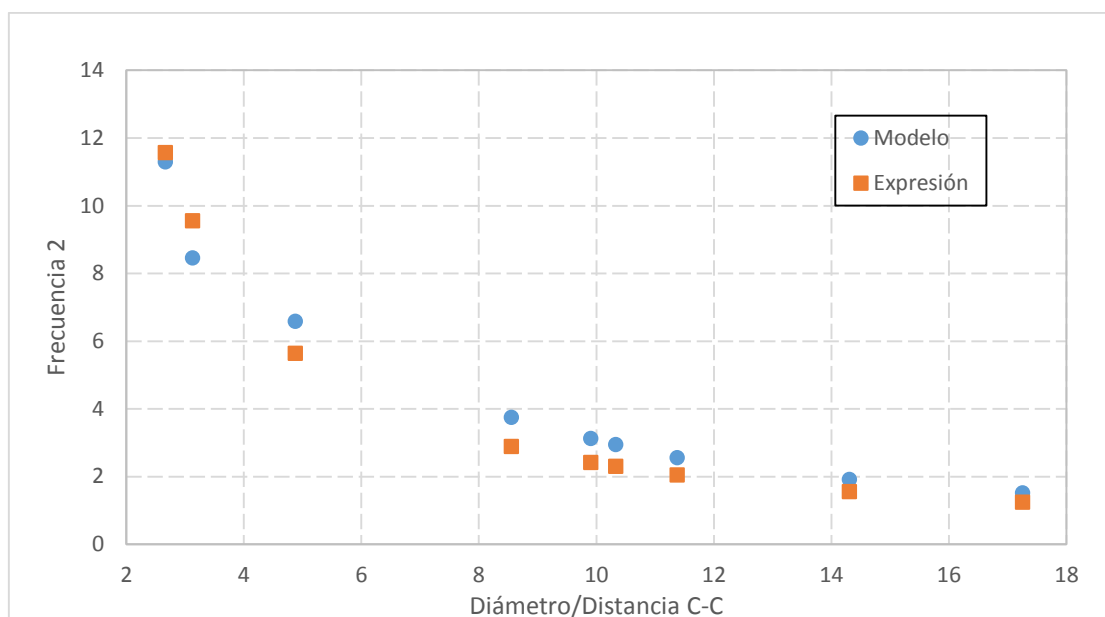
En el Anexo 5 se encuentran las figuras que representan las deformadas obtenidas en los cinco primeros modos propios de cada Fullerenos esférico estudiado, así como la geometría de partida de cada caso.

Se procede a comparar los resultados numéricos obtenidos mediante el empleo de Abaqus, con los resultados que se obtendrían de usar la expresión propuesta para el cálculo de frecuencias. Se puede ver en las siguientes figuras como la expresión propuesta (39) desprende unos resultados bastante aceptables.



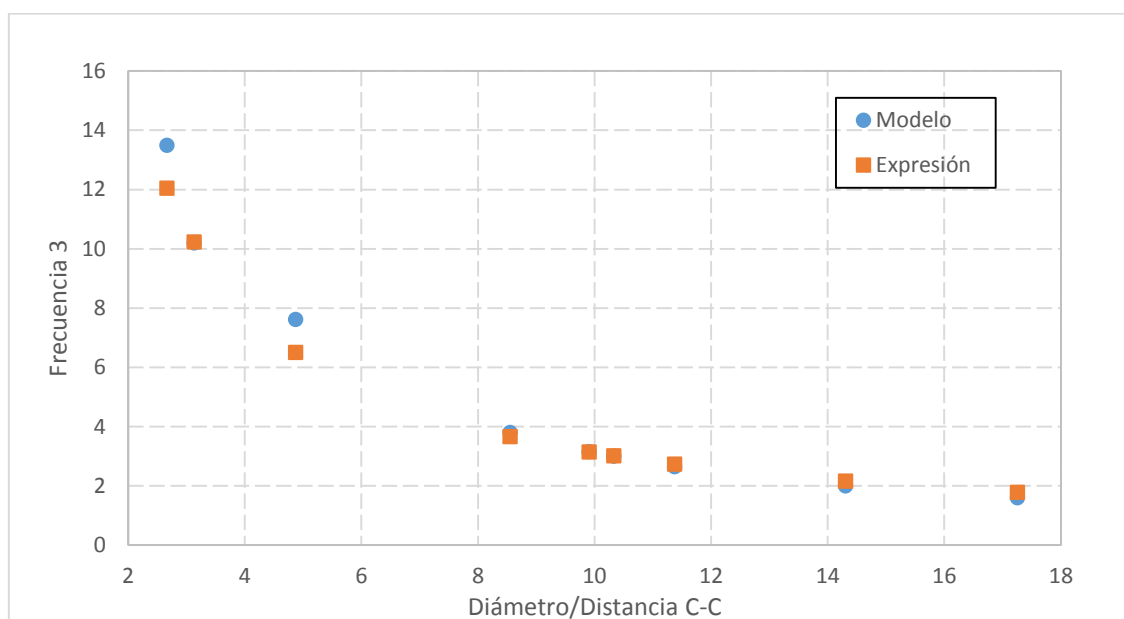
Gráfica 22. Modelo vs Expresión. Frecuencia 1.

Para la frecuencia 1 existe mayor error en los Fullerenos de menor tamaño y bastante exactitud en los de mayor tamaño.



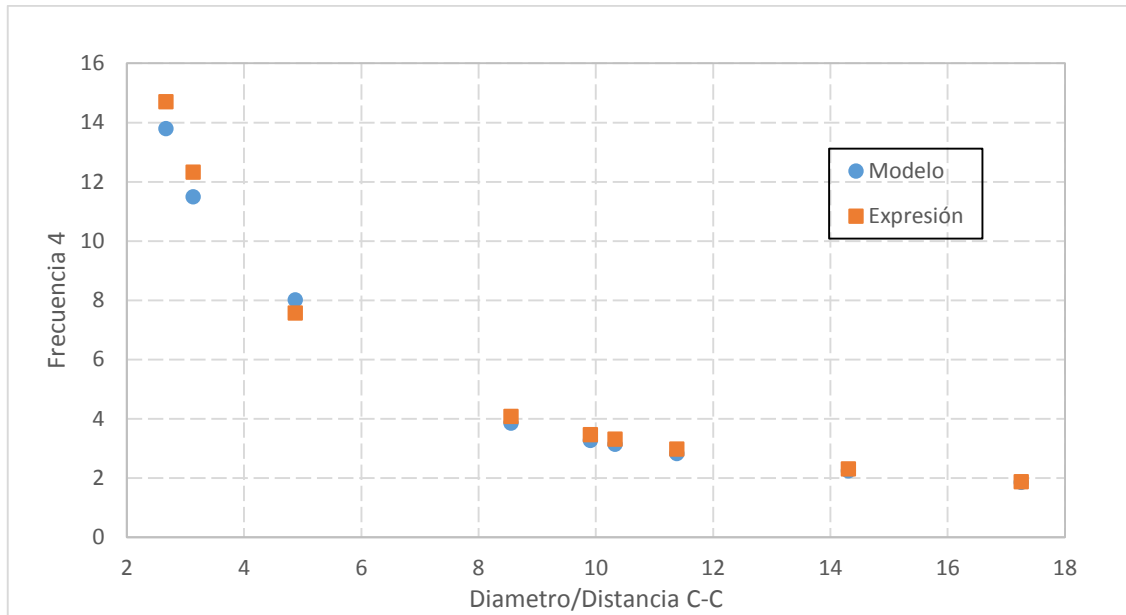
Gráfica 23. Modelo vs Expresión. Frecuencia 2.

Para la frecuencia 2 aparece mayor distorsión en los resultados. Con el fin de valorar esta distorsión se ha calculado el valor del error para cada frecuencia, calculado en tanto por ciento, y ofrecida la conclusión al final de este apartado.

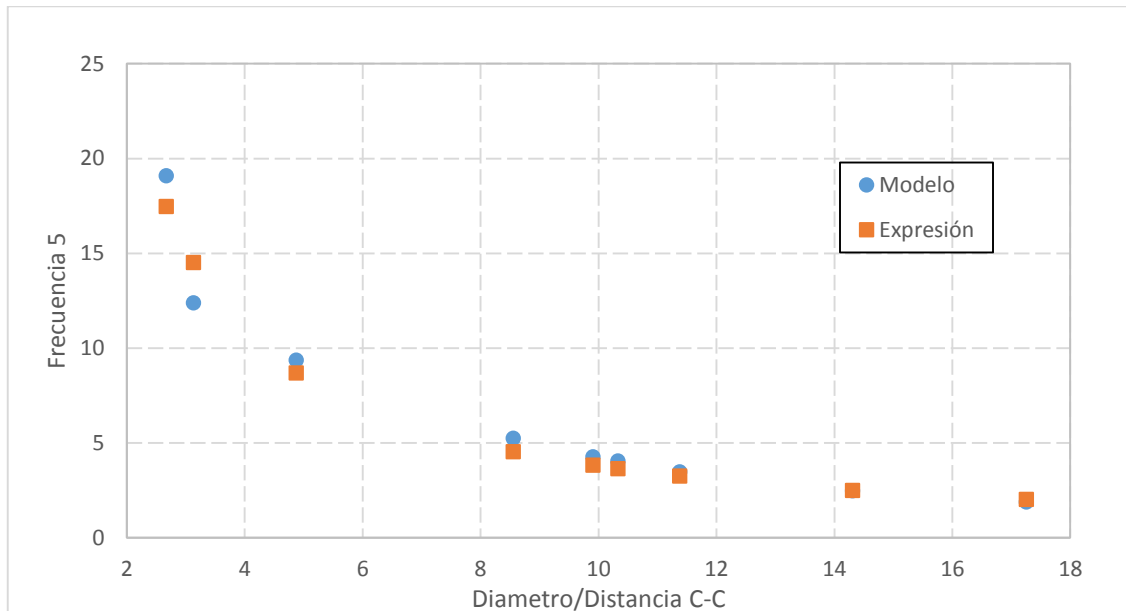


Gráfica 24. Modelo vs Expresión. Frecuencia 3.

Al igual que ocurría para la frecuencia 1, para la frecuencia 3 la expresión desprende valores más próximos al modelo para Fullerenos de mayor tamaño.



Gráfica 25. Modelo vs Expresión. Frecuencia 4.



Gráfica 26. Modelo vs Expresión. Frecuencia 1.

A continuación, se recoge el error entre los resultados obtenidos mediante el modelo implementado y los valores obtenidos del empleo de la expresión propuesta. De la misma forma que se procedió anteriormente, se hace uso de la siguiente expresión, que proporciona el error en tanto por ciento.

$$\text{Error (\%)} = \frac{\text{Valor Frec Modelo} - \text{Valor Frec Expresión}}{\text{Valor Frec Expresión}} * 100 \quad (40)$$

En términos generales puede decirse que los errores obtenidos son inferiores al 10%.



## Capítulo 7

### Conclusiones y trabajos futuros

## 7. Conclusiones y trabajos futuros.

### 7.1 Conclusiones

En la primera parte del trabajo se ha llevado a cabo una revisión bibliográfica de las diferentes nanoestructuras de carbono de simple capa, en la que se ha puesto de manifiesto el desarrollo que se ha realizado en este campo durante las últimas décadas. Se han detallado las geometrías, propiedades mecánicas y aplicaciones, de cada una de estas nanoestructuras.

Se ha implementado un Modelo Discreto basado en las ecuaciones de la mecánica estructural que importa las propiedades de la mecánica molecular para el modelado de nanoestructuras.

Los resultados obtenidos son comparados con los presentados por otros autores con la finalidad de validar el modelo implementado. De dicha comparación se puede observar que los resultados difieren ligeramente, considerándose aun así aceptables, ya que se trata de una primera toma de contacto con esta línea de investigación. Encontrándose en proceso de desarrollo y susceptible a posibles mejoras, se considera que los resultados obtenidos cumplen con los objetivos marcados.

La mayor ventaja del tipo de modelo implementado es el ahorro en costes computacionales y la reducción del tiempo de cálculo, en comparación con otros modelos como pueden ser aquellos basados en dinámica molecular.

A partir de los resultados obtenidos se han desarrollado ecuaciones que permiten calcular con fiabilidad y de manera expeditiva las frecuencias propias de nanoestructuras, como son el Grafeno y los Fullerenos esféricos.

### 7.2 Trabajos futuros

Con la finalización de este trabajo y dados los resultados obtenidos, no se da por cerrado el modelo numérico planteado sino que se abren caminos que pueden ser recorridos por nuevos estudios:

- Análisis de la influencia de defectos. Nuevas simulaciones para nanoestructuras con defectos, como pueden ser vacantes de átomos de carbono. Así analizar el efecto que producen estas imperfecciones en las propiedades mecánicas y dinámicas.
- Estudio de nanoestructuras multi-capas. Implementación en Abaqus de las relaciones que permiten el estudio de Multi Walled Carbon Nanotubes.



## Referencias

## 7. Referencias.

- [1] Kroto H W et al. R E 1985 C-60: Buckminsterfullerene Nature 318 162–3
- [2] Iijima S. Helical microtubes of graphitic carbon. Nature 1991; 354:56-8
- [3] R. Rafiee et al. On the modeling of carbon nanotubes. Composites: Part B 56 (2014) 435-449
- [4] The official Web Site of the Nobel Prize. <http://www.nobelprize.org/> Visitada en Mayo de 2014
- [5] R. Martínez et al. Aplicaciones de los nanotubos de carbono. Informe Vigilancia Tecnológica
- [6] M. L Roukes. Condensed Matter Physics 114-36, California Institute of Technology. Pasadena CA 91125
- [7] H. D. Espinosa et al. Nanoelectromechanical Systems: Experiments and Modeling. Encyclopedia of Materials: Science and Technology
- [8] Hone et al.: Graphene Nanoelectromechanical Systems
- [9] M. F.L De Volder, et al. Carbon Nanotubes: Present and Future Commercial Applications. Science (2013) 339, 535.
- [10] J. Aranda Ruiz. Análisis de las vibraciones de nanovigas rotatorias basado en la teoría de la elasticidad no local de Eringen.
- [11] <http://www.cheaptubes.com/> Visitada en Agosto de 2014
- [12] <http://www.epa.gov/> Visitada en Mayo de 2014.
- [13] <http://boletin-noticias-nanotecnologia.euroresidentes.com/2007/03/clasificacin-de-nanomateriales.html> Visitada en Junio de 2014
- [14] <http://www.artinaid.com/2013/04/el-carbono/> Visitada en Mayo de 2014
- [16] Goldwhite, Harold. Química Universitaria. Sistemas técnicos de edición. (1990)
- [17] S. Zubiaurre et al. Química. Anaya (2009)
- [18] A. Cortijo, Propiedades físicas de grafeno en presencia de desorden topológico. Tesis Doctoral Universidad Carlos III. Madrid. (2007)
- [19] Qian et al. Mechanics of carbon nanotubes. Appl Mech Rev vol 55, no 6, November 2002
- [20] M. Meo et al. Materials Science and Engineering A 454-455 (2007) 170-177
- [21] G. A. Guirales et al. Modelos geométricos en el estudio de nanotubos de carbono.



- [22] C. Li, T.-W. Chou. International Journal of Solids and Structures 40 (2003) 2487–2499
- [23] Hibbitt, Karlsson, Sorensen, Inc. ABAQUS/standard user's manual, v. 6.10. Pawtucket, Rhode Island; 2004.
- [24] <http://www.rose-hulman.edu/SCAN/nanopics/> Visitada en Enero de 2014
- [25] Nanotube Modeler 2005-2013 JCrystalSoft. Fullerene Library.
- [26] P. Papanikos et al. Computational Materials Science 43 (2008) 345-352
- [27] A. Sakhaee-Pour et al. Thin Walled Structures 47 (2009) 646-652
- [28] S. S. Gupta et al. Elastic Properties and Frequencies of Free vibrations of Single-Layer Graphene Sheets Journal of Computational and Theoretical Nanoscience Vol. 7, 1–14, 2010
- [29] Liu et al. Mechanical Properties of Graphene Papers. Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing 100084, China.





## Anexos



## Anexo 1. Código desarrollado para generar la geometría de nanotubos de carbono.

```
clc

clear all

hd = 0.246;

U1 = hd*[1;0];

U2 = hd*[cos(pi/3);sin(pi/3)];

bl = (hd/2)*sec(pi/6); % bondlength

atomup = bl*[cos(pi/6);sin(pi/6)];

atomdown = bl*[cos(pi/6);-sin(pi/6)];

clear hd bl

%% Parametros que definen el nanotubo

n = ;

m = ;

ch = 1; ch =ch/abs(ch);

% Vector Chiral

B = n*U1+m*U2;

lB = sqrt(B'*B);

diametro = lB/pi;

% compute unit cell vector

d = gcd(2*m+n,2*n+m);

t1 =(n+2*m)/d;

t2 =-(2*n+m)/d;

T = t1*U1+t2*U2;

lT = sqrt(T'*T);

L1 = ;

L2 = L1;

% Coordenadas ortogonales adaptadas al nanotubo

V = B/lB;

W = [V(2); -V(1)];
```



```
if det([V,W]) < 0, W = -W; end;

a = U1;

b = U2;

if B'*a < 0, a = -a; b = -b;end;

if T'*b == 0, c = a; a = b; b = c; end;

% Compute lattice coefficients and lattice points

eps = 1/1000; %fudge factor

cHLpts = [];

s2 = floor(lb/(V'*a)+eps)+1;

for s = 0:s2

    t1 = ceil((-L2-s*W'*a)/(W'*b));

    t2 = floor((L1-s*W'*a)/(W'*b));

    if t1 > t2, t3 = t1; t1 = t2; t2 = t3; end; % ensure that t2 >= t1

    cHLpts = [cHLpts,[s*ones(1,t2-t1+1);t1:t2]];

end;

HLpts = [a,b]*cHLpts; % lattice of hexagon centers


clear a b cHLpts t2 t1 t3 s2 eps


% Compute lattices of atoms points

LAup = [HLpts(1,:)+atomup(1);HLpts(2,:)+atomup(2)];

LAdown = [HLpts(1,:)+atomdown(1);HLpts(2,:)+atomdown(2)];


% Rotate and compute tube points

A = [V,ch*W]'; % create rotation matrix

% transform points into X-Y coordinates X -> tube latitude Y -> tube meridian

RLAup = A*LAup;

RLAdown = A*LAdown;
```



```
clear A V ch W LAup LAdown atomdown atomup HLpts
```

```
% Transform to 3-D tube coordinates
```

```
R = IB/(2*pi);
```

```
%%% Origin
```

```
X0 = R;
```

```
Y0 = 0;
```

```
Z0 = 0;
```

```
%%% Lattice points (atoms)
```

```
Xu = R*cos(RLAup(1,)/R);
```

```
Yu = R*sin(RLAup(1,)/R);
```

```
Zu = RLAup(2,);
```

```
Xd = R*cos(RLAdown(1,)/R);
```

```
Yd = R*sin(RLAdown(1,)/R);
```

```
Zd = RLAdown(2,);
```

```
clear RLAdown RLAup X0 Y0 Z0 IB
```

```
nodosx=[Xu';Xd'];
```

```
nodosy=[Yu';Yd'];
```

```
nodosz=[Zu';Zd'];
```

```
clear Xu Yu Zu Xd Yd Zd
```

```
nodosxy=[nodosx nodosy];
```

```
nodos=[nodosxy nodosz]; %Matriz de nodos
```

```
clear nodosxy nodosz nodosx nodosy
```

```
aux = find(abs(nodos(:,2))<0.05);
```

```
nodos(aux,2) = 0;
```



% Se redondean las posiciones a 5 decimales.

```
nodos = nodos*1e5;
```

```
nodos = round(nodos);
```

```
nodos = nodos/1e5;
```

% Se eliminan los nodos repetidos

```
LIMPIAR = unique(nodos,'rows');
```

```
clear nodos aux
```

```
nodos = LIMPIAR;
```

```
N = size(nodos,1); %Número de nodos
```

% Distancia minima entre átomos

```
distmin = 0.14199;
```

```
%%
```

% Se definen las conectividades iniciales.

```
%
```

```
pp = 1;
```

```
for i=1:N
```

```
    for j=1:N
```

```
        varx=nodos(i,1)-nodos(j,1);
```

```
        vary=nodos(i,2)-nodos(j,2);
```

```
        varz=nodos(i,3)-nodos(j,3);
```

```
        [phi, theta, r] = cart2sph(varx,vary,varz);
```

```
        if r <=1.1*distmin && r>0.01*distmin
```

```
            elemento(pp,1) = i;
```

```
            elemento(pp,2) = j;
```

```
            pp = pp+1;
```

```
        end
```

```
    end
```



```
end

clear i j r theta varx vary varz phi pp LIMPIAR

N_elemento = size(elemento,1);

%%%

% Se eliminan nodos de los extremos.

% Los nodos que se eliminan son aquellos que tienen un solo enlace.

k = 1;

for i=1:N

    if size(find(elemento==i),1)==2

        n_delete(k) = i;

        k = k+1;

    end

end

nodos(n_delete,:) = [];

N = size(nodos,1);

clear elemento N_elemento

%%%

% Se vuelven a definir las conectividades para el nanotubo pero sin los

% nodos de los extremos.

% %

pp = 1;

for i=1:N

    for j=1:N

        varx=nodos(i,1)-nodos(j,1);

        vary=nodos(i,2)-nodos(j,2);

        varz=nodos(i,3)-nodos(j,3);
```



```
[phi, theta, r] = cart2sph(varx, vary, varz);  
  
if r <= 1.1*distmin && r > 0.01*distmin  
  
    elemento(pp,1) = i;  
  
    elemento(pp,2) = j;  
  
    pp = pp+1;  
  
end  
  
end  
  
clear i j r theta varx vary varz phi pp LIMPIAR  
  
N_elemento = size(elemento,1);  
  
%%  
  
% Se eliminan los elementos repetidos.  
  
%  
  
k = 1;  
  
A = zeros(N_elemento/2,2);  
  
for i=1:N_elemento  
  
    if size(intersect(A,[elemento(i,2) elemento(i,1)], 'rows'),1)==0  
  
        A(k,1) = elemento(i,1);  
  
        A(k,2) = elemento(i,2);  
  
        k = k+1;  
  
    end  
  
end  
  
clear elemento  
  
elemento = A;  
  
N_elemento = size(elemento,1);  
  
clear A  
  
  
  
%%
```



```
% Se agrega a la matriz de nodos la columna enumeracion

aux = 1:N;

nodos = [aux' nodos];

aux1 = 1:N_elemento;

elemento = [aux1' elemento];

clear aux aux1

%%

% Se presenta el nanotubo

figure(1)

axis equal

hold on

plot3(nodos(:,2),nodos(:,3),nodos(:,4),'.b')

for i=1 : N_elemento

    plot3(nodos(elemento(i,2:3),2),nodos(elemento(i,2:3),3),nodos(elemento(i,2:3),4),'-r')

end

clear i

Longitud_real = 2*max(nodos(:,4));

%% Se crea el archivo de preproceso

FILE = 'prueba.inp';

fichero= fopen( FILE, 'w' );

fprintf( fichero, '*HEADING\n');

fprintf( fichero, '*PREPRINT, ECHO=NO, MODEL=NO, HISTORY=NO, CONTACT=NO\n');

fprintf( fichero, '*NODE\n');

fprintf( fichero, '\t%d,\t\t%f,\t\t%f,\t\t%f\n', (nodos'));

fprintf( fichero, '*ELEMENT, TYPE=B31\n' );

fprintf( fichero, '\t%d,\t%d,\t%d\n', (elemento'));

fclose( fichero );
```





## Anexo 2. Código desarrollado para generar la geometría del Grafeno.

```
clc
```

```
clear all
```

```
ancho=;
```

```
alto=;
```

```
i=1;
```

```
%
```

```
for y=0:0.426:alto
```

```
    for x=0.123:0.246:ancho
```

```
        nodos(i,1)=x;
```

```
        nodos(i,2)=y;
```

```
        i=i+1;
```

```
    end
```

```
end
```

```
for y=0.284:0.426:alto
```

```
    for x=0.123:0.246:ancho
```

```
        nodos(i,1)=x;
```

```
        nodos(i,2)=y;
```

```
        i=i+1;
```

```
    end
```

```
end
```

```
for y=0.071:0.426:alto
```

```
    for x=0:0.246:ancho
```

```
        nodos(i,1)=x;
```

```
        nodos(i,2)=y;
```

```
        i=i+1;
```

```
    end
```



end

```
for y=0.213:0.426:alto
```

```
    for x=0:0.246:ancho
```

```
        nodos(i,1)=x;
```

```
        nodos(i,2)=y;
```

```
        i=i+1;
```

```
    end
```

```
end
```

```
% Número de nodos
```

```
N = size(nodos,1);
```

```
alturareal= max(nodos(:,2));
```

```
anchoreal=max(nodos(:,1))-min(nodos(:,1));
```

```
pp = 1;
```

```
distancia = zeros(N,N);
```

```
distmin=0.142;
```

```
for i=1:N;
```

```
    for j=1:N
```

```
        varx=nodos(i,1)-nodos(j,1);
```

```
        vary=nodos(i,2)-nodos(j,2);
```

```
        distancia(i,j)=((varx)^2+(vary)^2)^(1/2);
```

```
    end
```

```
end
```

```
for i=1:N
```

```
    for j=1:N
```

```
        if distancia(i,j) <1.05*distmin && distancia(i,j)>0.139
```

```
            elemento(pp,1) = i;
```

```
            elemento(pp,2) = j;
```



```
        pp = pp+1;
    end
end
end

%%
%% Se eliminan los elementos repetidos.
N_elemento = size(elemento,1);
N_elemento=N_elemento-1;
k = 1;
A = zeros(N_elemento/2,2);
for i=1:N_elemento
    if size(intersect(A,[elemento(i,2) elemento(i,1)],'rows'),1)==0
        A(k,1) = elemento(i,1);
        A(k,2) = elemento(i,2);
        k = k+1;
    end
end
end
clear elemento
elemento = A;
N_elemento = size(elemento,1);
clear A
%%
% Se agrega a la matriz de nodos la columna enumeración
aux = 1:N;
nodos = [aux' nodos];
aux1 = 1:N_elemento;
elemento = [aux1' elemento];

clear aux aux1
```



% Se presenta la lámina de grafeno

figure(1)

axis equal

hold on

plot(nodos(:,2),nodos(:,3),'.b')

for i=1 : N\_elemento

    plot(nodos(elemento(i,2:3),2),nodos(elemento(i,2:3),3),'-r')

end

clear i

FILE = 'prueba.inp';

fichero= fopen( FILE, 'w' );

fprintf( fichero, '\*HEADING\n');

fprintf( fichero, '\*PREPRINT, ECHO=NO, MODEL=NO, HISTORY=NO, CONTACT=NO\n');

fprintf( fichero, '\*NODE\n');

fprintf( fichero, '\t%d,\t\t%f,\t\t%f,\n', (nodos));

fprintf( fichero, '\*ELEMENT, TYPE=B31\n' );

fprintf( fichero, '\t%d,\t%d,\t%d\n', (elemento));

fclose( fichero );



### Anexo 3. Código desarrollado para generar la geometría de Fullerenos.

```
clc

% Se definen las conectividades iniciales.

%
nodos(:,2)=nodos(:,2)*(1/10);
nodos(:,3)=nodos(:,3)*(1/10);
nodos(:,4)=nodos(:,4)*(1/10);

N=size(nodos,1);

distmin=10;

distancia = zeros(N,N);

for i=1:N;
    for j=1:N
        varx=nodos(i,2)-nodos(j,2);
        vary=nodos(i,3)-nodos(j,3);
        varz=nodos(i,4)-nodos(j,4);

        distancia(i,j)=((varx)^2+(vary)^2+(varz)^2)^(1/2);

        if distancia(i,j) <= 1.10*distmin && distancia(i,j)>0.00001;
            distmin=distancia(i,j);
        end
    end
end

pp = 1;

for i=1:N
    for j=1:N
        varx=nodos(i,2)-nodos(j,2);
        vary=nodos(i,3)-nodos(j,3);
        varz=nodos(i,4)-nodos(j,4);

        [phi, theta, r] = cart2sph(varx,vary,varz);

        if r <=1.1*distmin && r>0.01*distmin

            elemento(pp,1) = i;
```



```
    elemento(pp,2) = j;
    pp = pp+1;
end
end
end
clear i j r theta varx vary varz phi pp LIMPIAR
N_elemento = size(elemento,1);
%
k = 1;
A = zeros(N_elemento/2,2);
for i=1:N_elemento
    if size(intersect(A,[elemento(i,2) elemento(i,1)],'rows'),1)==0
        A(k,1) = elemento(i,1);
        A(k,2) = elemento(i,2);
        k = k+1;
    end
end
end
clear elemento
elemento = A;
N_elemento = size(elemento,1);
clear A

%%
% Se agrega a la matriz de nodos la columna enumeracion
% aux = 1:N;
% nodos = nodos*(1e-6);
% nodos = [aux' nodos];
aux1 = 1:N_elemento;
elemento = [aux1' elemento];
```



clear aux aux1

%%

% Se grafica fullerenos

figure(1)

axis equal

hold on

plot3(nodos(:,2),nodos(:,3),nodos(:,4),'.b')

for i=1 : N\_elemento

plot3(nodos(elemento(i,2:3),2),nodos(elemento(i,2:3),3),nodos(elemento(i,2:3),4),'-r')

end

clear i

%%

%%

FILE = 'prueba.inp';

fichero= fopen( FILE, 'w' );

fprintf( fichero, '\*HEADING\n');

fprintf( fichero, '\*PREPRINT, ECHO=NO, MODEL=NO, HISTORY=NO, CONTACT=NO\n');

fprintf( fichero, '\*NODE\n');

fprintf( fichero, '\t%d,\t\t%f,\t\t%f,\t\t%f\n', (nodos));

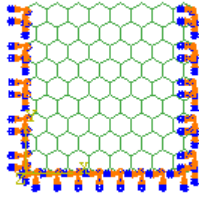
fprintf( fichero, '\*ELEMENT, TYPE=B31\n' );

fprintf( fichero, '\t%d,\t%d,\t%d\n', (elemento));

fclose( fichero );

## Anexo 4. Expresiones y regresiones de las mono capas de Grafeno

- Configuración 2



Expresiones que permiten el cálculo de frecuencia.

$$f_1 = 19813 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.978} \quad R^2 = 0.9998 \quad (1)$$

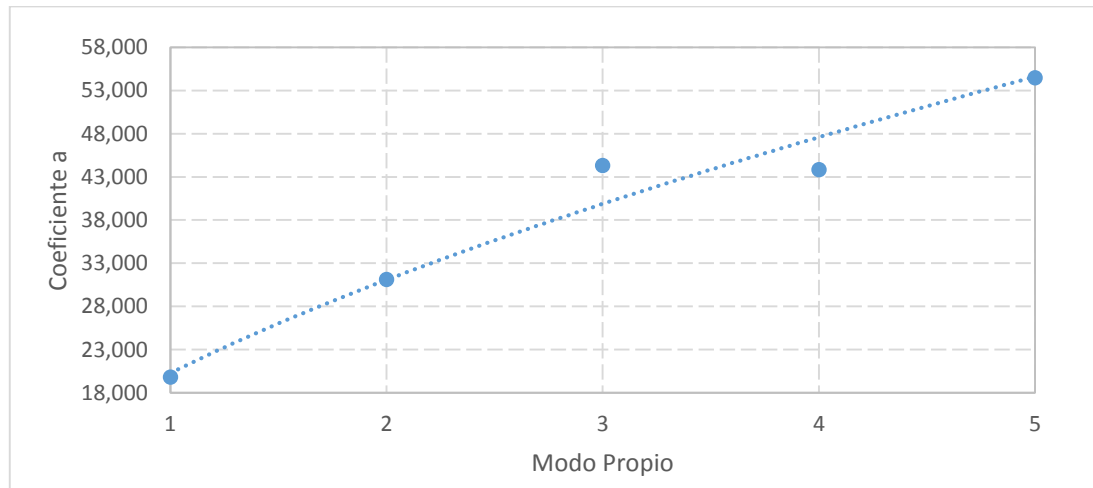
$$f_2 = 31126 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.967} \quad R^2 = 0.9996 \quad (2)$$

$$f_3 = 44326 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.947} \quad R^2 = 0.9991 \quad (3)$$

$$f_4 = 43830 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.91} \quad R^2 = 0.9964 \quad (4)$$

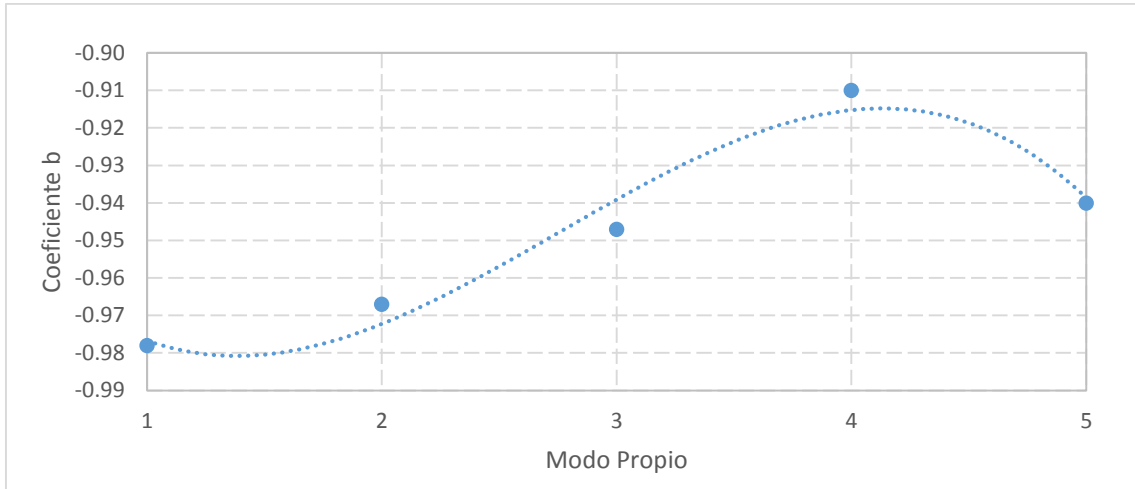
$$f_5 = 54490 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.94} \quad R^2 = 0.9991 \quad (5)$$

Gráficas de los coeficientes de las regresiones potenciales.



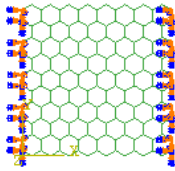
Gráfica 27. Coeficiente *a*.





Gráfica 28. Coeficiente b.

- Configuración 3



Expresiones que permiten el cálculo de frecuencia.

$$f_1 = 18416 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.98} \quad R^2 = 0.9998 \quad (6)$$

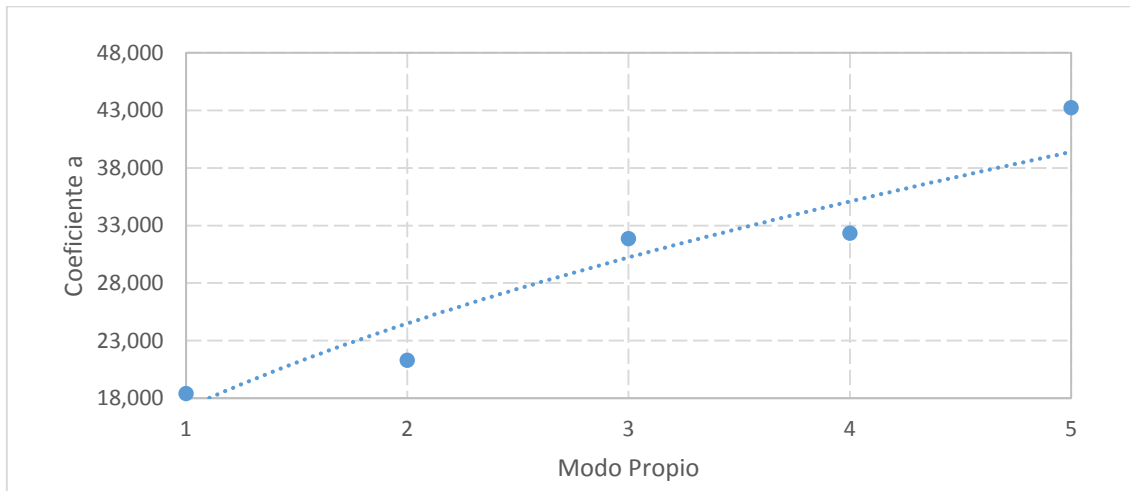
$$f_2 = 21312 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.97} \quad R^2 = 0.9998 \quad (7)$$

$$f_3 = 31880 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.954} \quad R^2 = 0.9996 \quad (8)$$

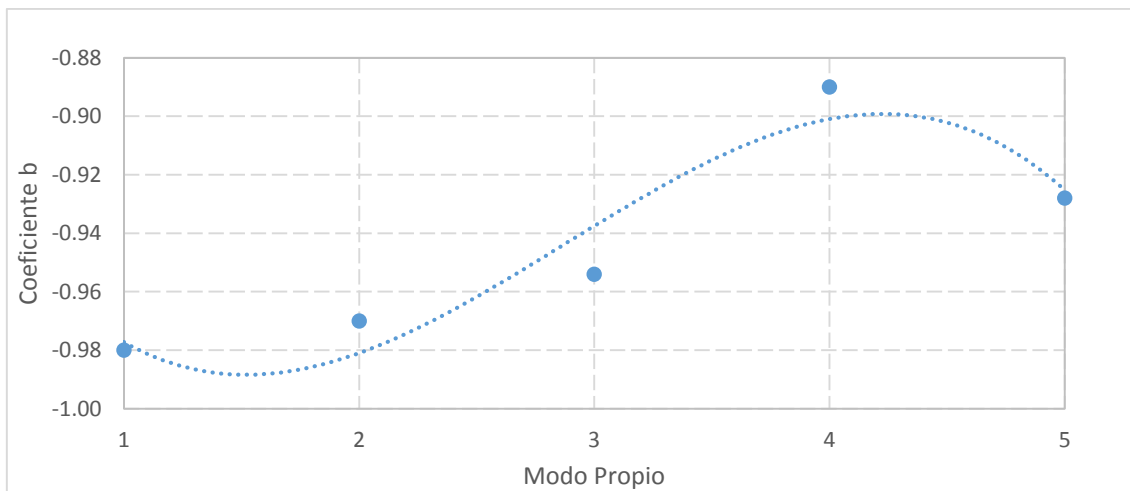
$$f_4 = 32343 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.89} \quad R^2 = 0.9931 \quad (9)$$

$$f_5 = 43253 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.928} \quad R^2 = 0.9982 \quad (10)$$

Gráficas de los coeficientes de las regresiones potenciales.

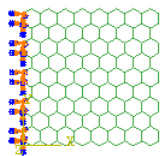


Gráfica 29. Coeficiente a.



Gráfica 30. Coeficiente b.

- Configuración 4



Expresiones que permiten el cálculo de frecuencia.

$$f_1 = 2793 \left( \frac{L}{a_{cc}} \right)^{-0.983} \quad R^2 = 0.9999 \quad (11)$$

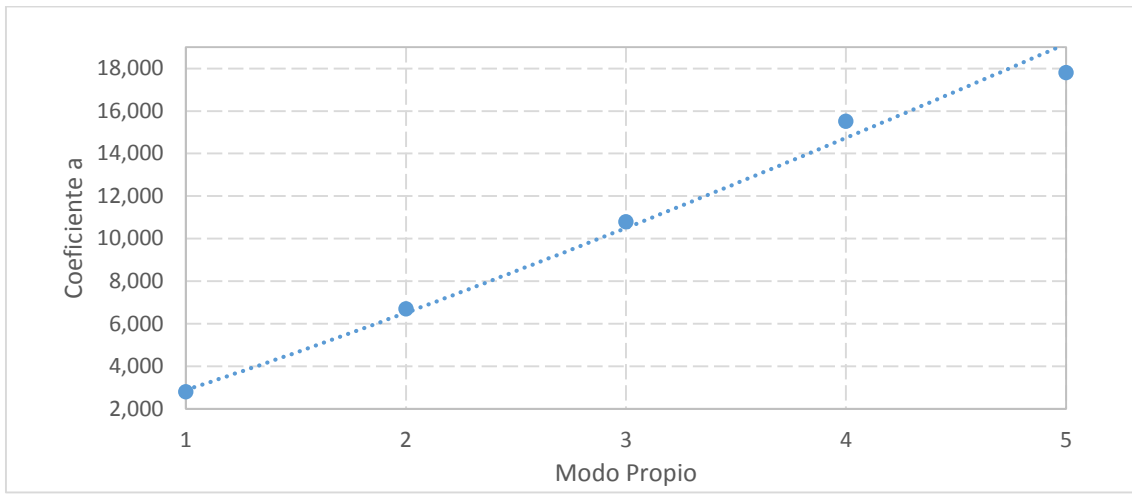
$$f_2 = 6694.8 \left( \frac{L}{a_{cc}} \right)^{-0.961} \quad R^2 = 0.9997 \quad (12)$$

$$f_3 = 10787 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.881} \quad R^2 = 0.9916 \quad (13)$$

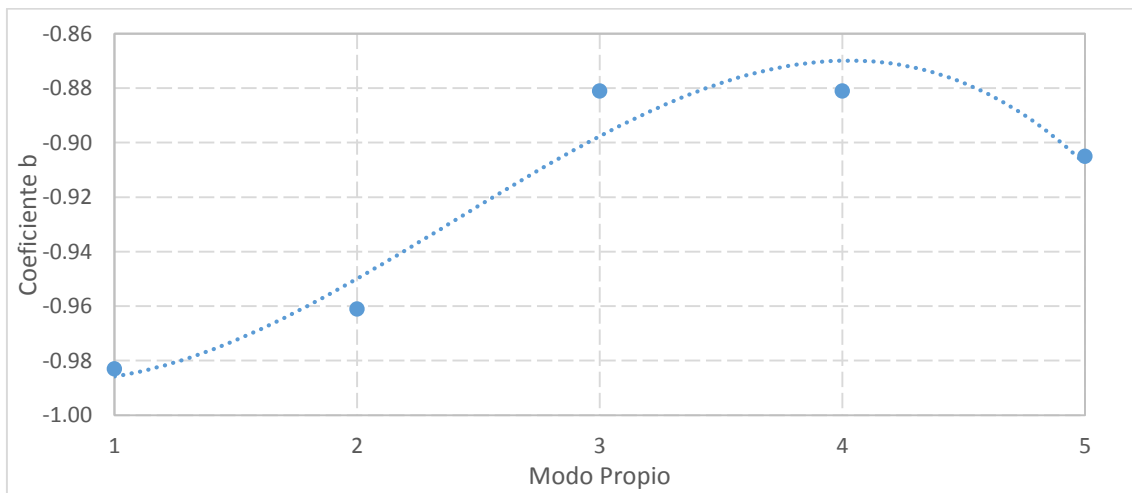
$$f_3 = 15510 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.912} \quad R^2 = 0.9972 \quad (14)$$

$$f_5 = 17792 \left(\frac{L}{a_{cc}}\right)^{-0.905} \quad R^2 = 0.9986 \quad (15)$$

Gráficas de los coeficientes de las regresiones potenciales.



Gráfica 31. Coeficiente a.



Gráfica 32. Coeficiente b.

## Anexo 5. Figuras de los cinco primeros modos propios Fullerenos Esféricos.

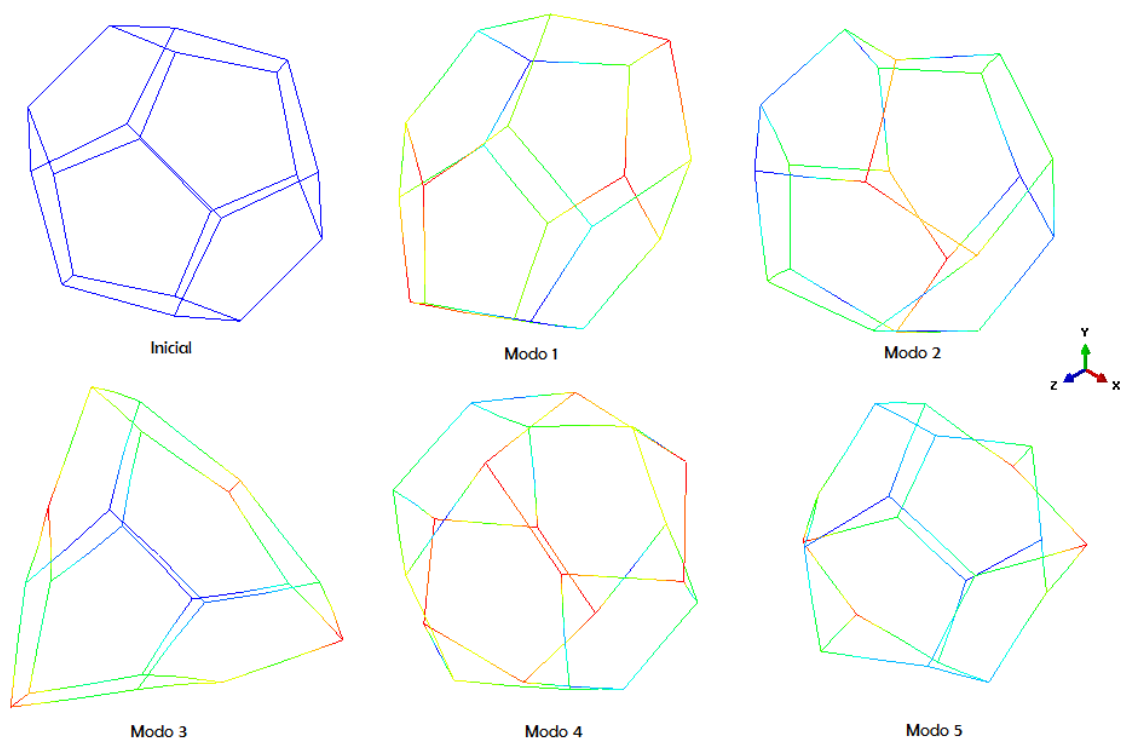


Figura 52. Modos Propios C<sub>20</sub>

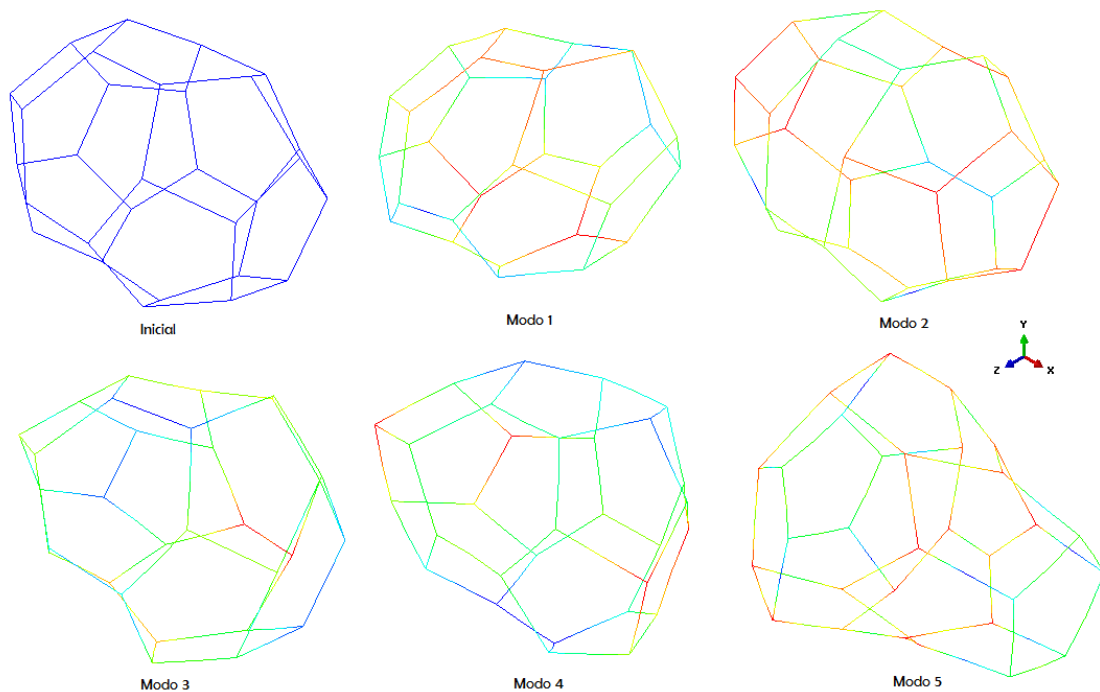


Figura 53. Modos Propios C<sub>30</sub>

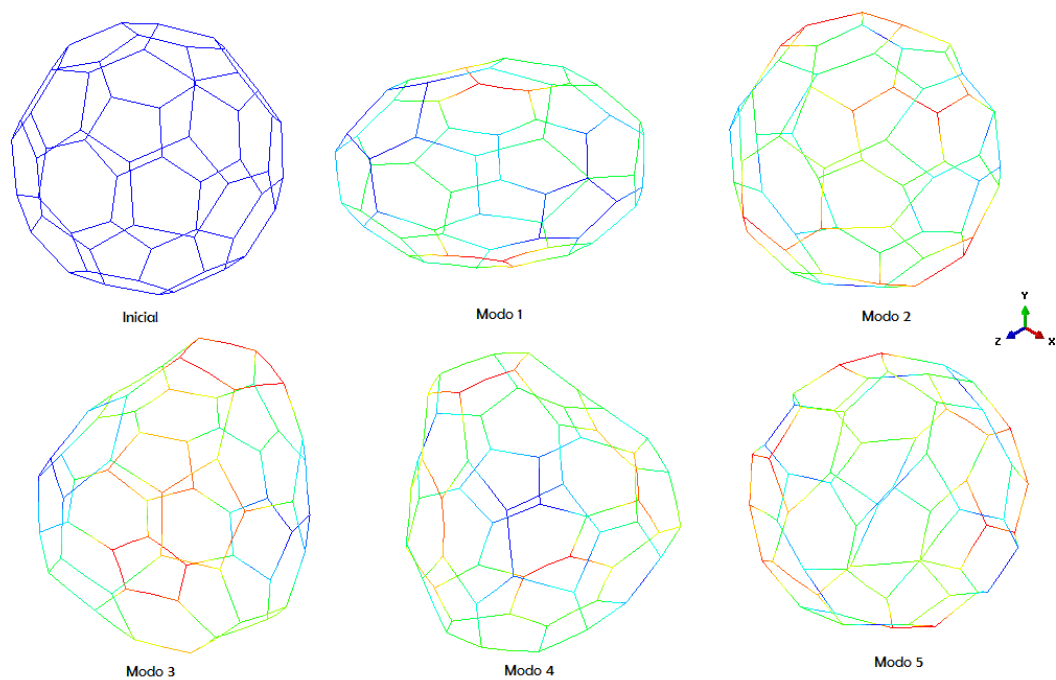


Figura 54. Modos Propios C60

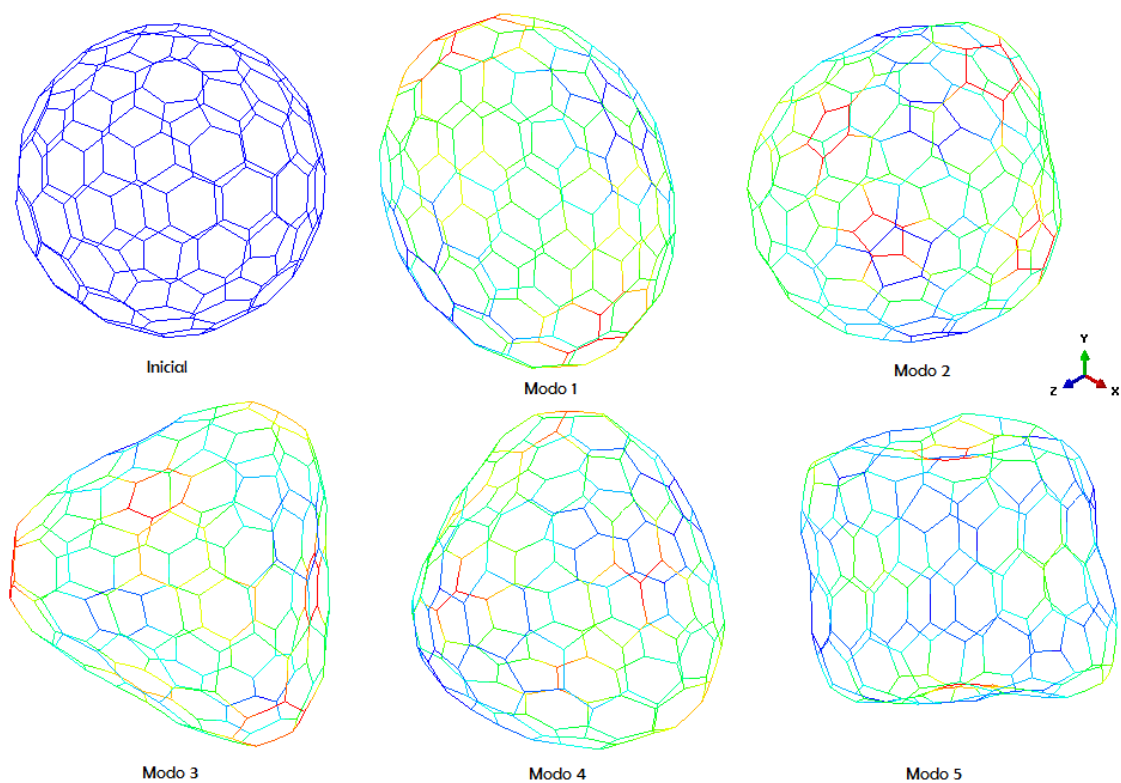


Figura 55. Modos Propios C180

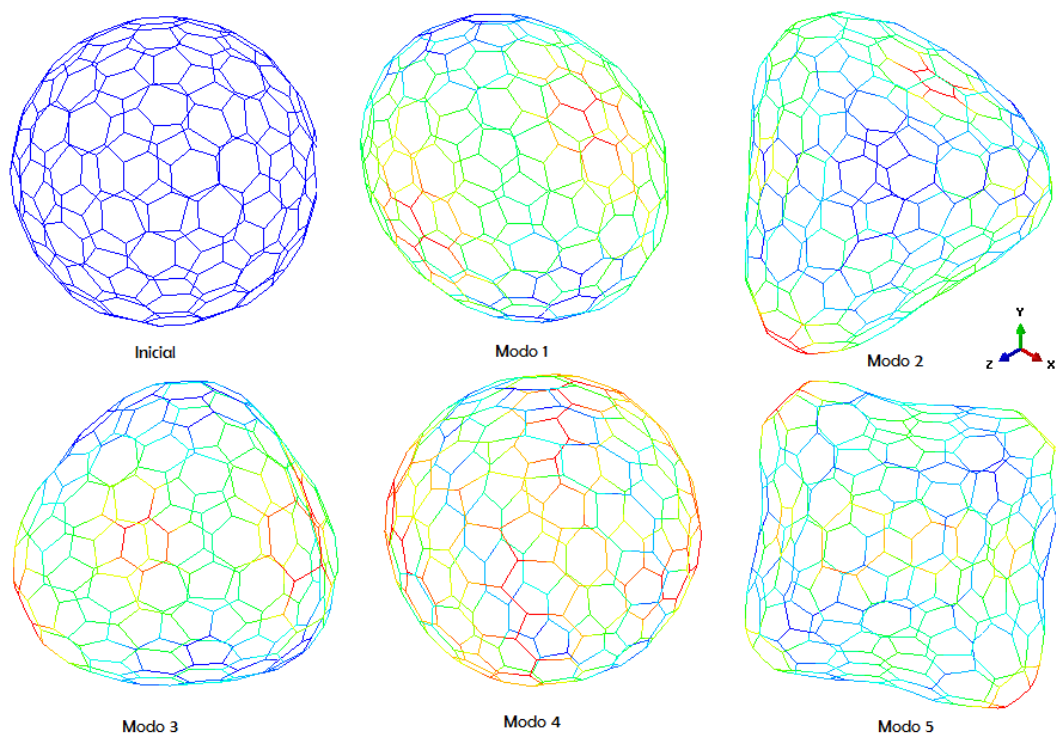


Figura 56. Modos Propios C240

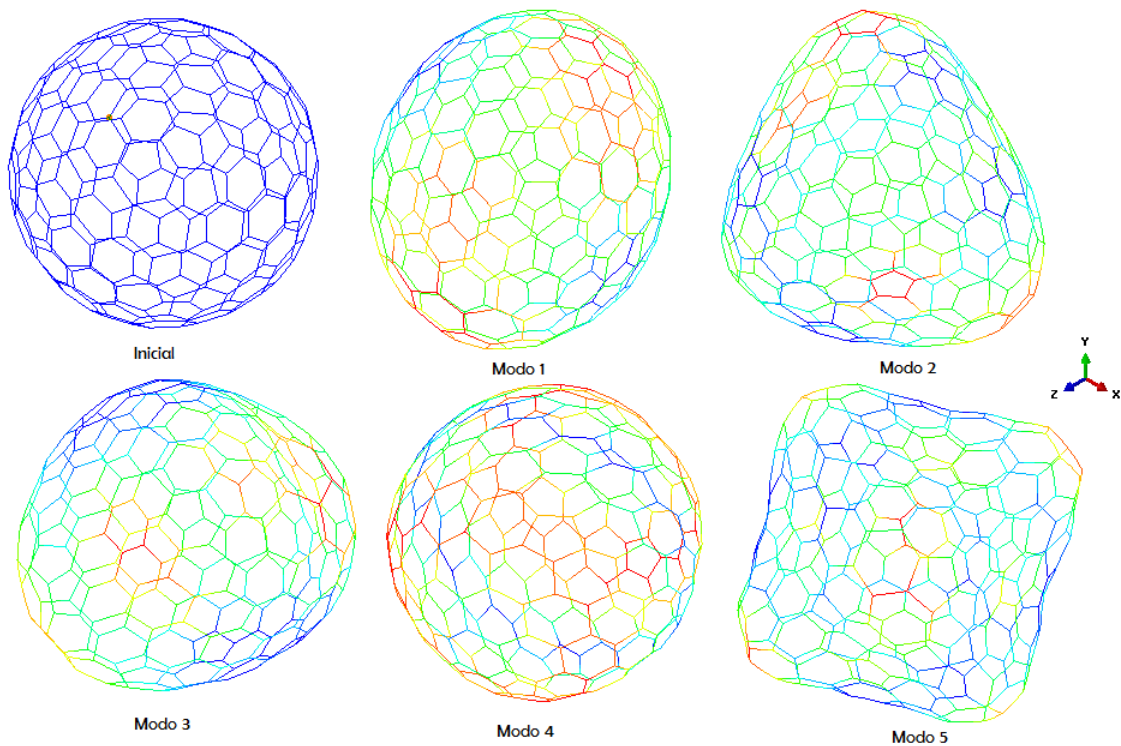


Figura 57. Modos Propios C260

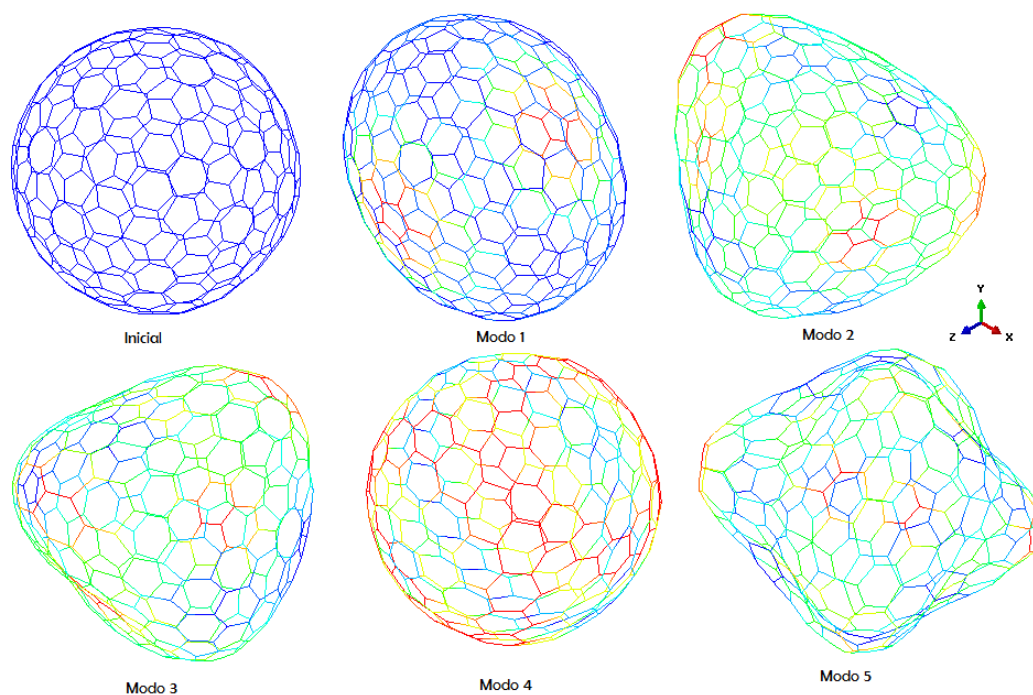


Figura 58. Modos Propios C320

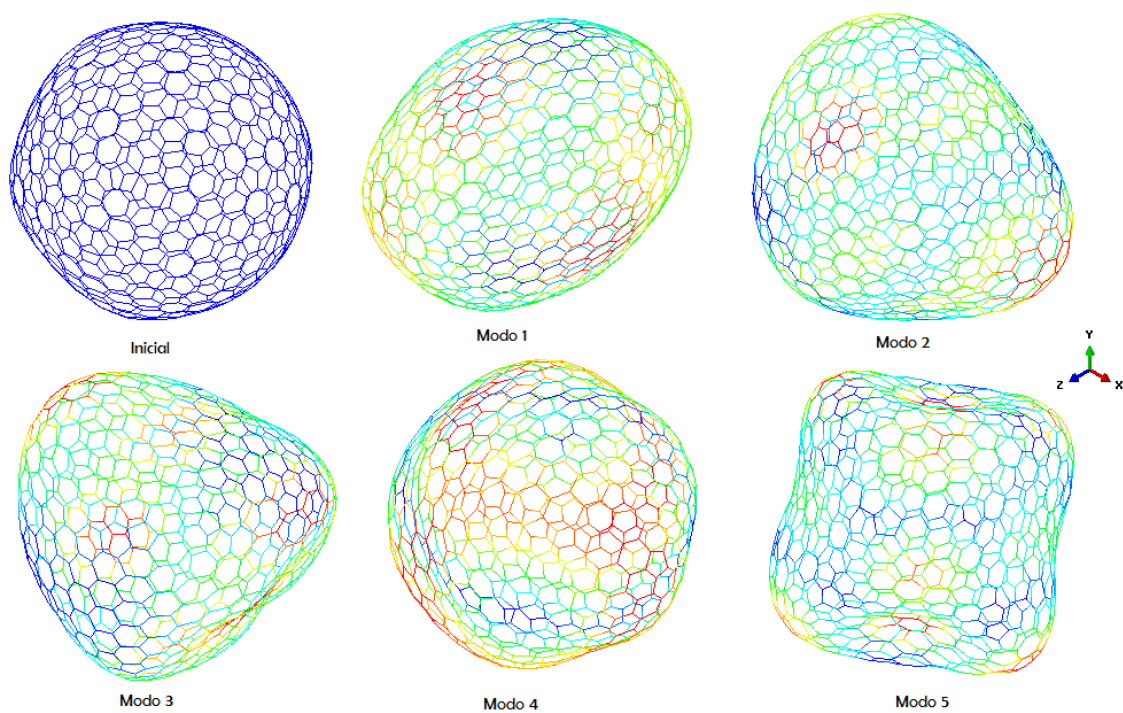


Figura 59. Modos Propios C720

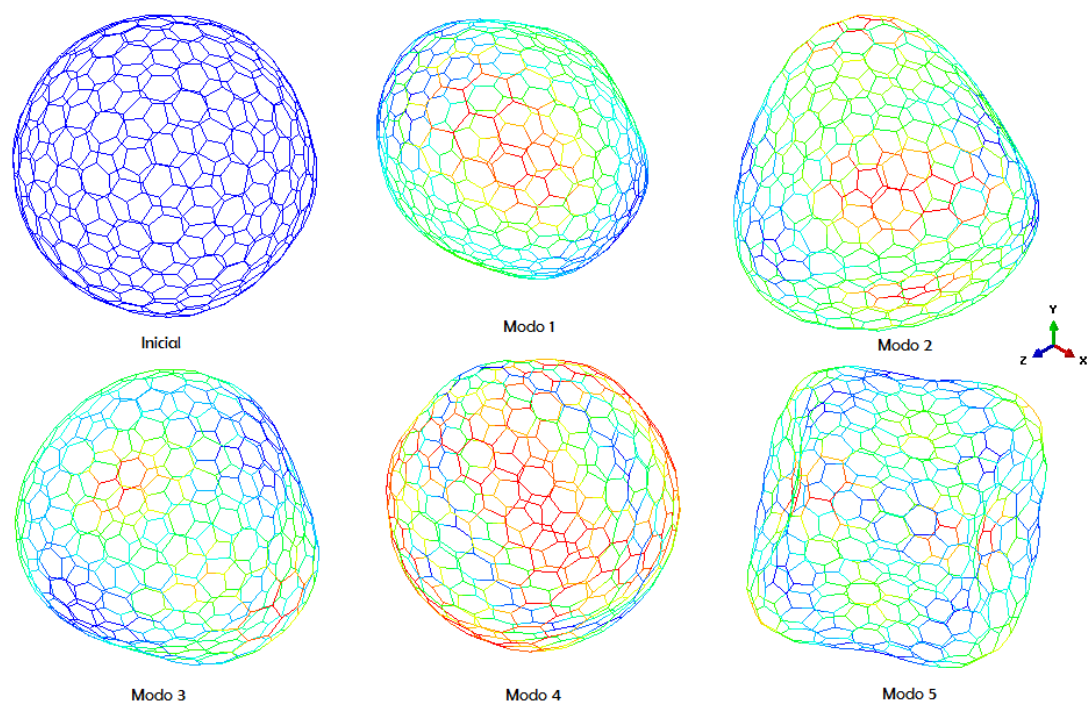


Figura 60. Modos Propios C500.